T H E S E

présentée

A L'UNIVERSITE DE PARIS-SUD
CENTRE D'OSRAY

Pour obtenir le titre de Docteur 3ème Cycle

SPECIALITE : PHYSIQUE NUCLEAIRE APPROFONDIE

OPTION : PHYSIQUE DES REACTEURS

par

Marc GRANDOTTO-BIETTOLI

Sujet de la thèse : AUTOSECOL : UN CALCUL AUTOMATIQUE DE L'AUTOPROTECTION DES RESONANCES DES ISOTOPES LOURDS

Soutenue le 11 05 76 *devant la Commission d'examen*

MM. J. HOROWITZ — *Président*

J. BUSSAC

A. KAVENOKY — *Examinateurs*

M. CHABRILLAC

T H E S E

présentée

A L'UNIVERSITE DE PARIS-SUD
CENTRE D'OSRAY

Pour obtenir le titre de Docteur 3ème Cycle

SPECIALITE : PHYSIQUE NUCLEAIRE APPROFONDIE

OPTION : PHYSIQUE DES REACTEURS

par

Marc GRANDOTTO-BIETTOLI

Sujet de la thèse : AUTOSECOL : UN CALCUL AUTOMATIQUE DE L'AUTOPROTECTION DES RESONANCES DES ISOTOPES LOURDS

Soutenue le *devant la Commission d'examen*

MM. J. HOROWITZ *Président*

J. BUSSAC

A. KAVENOKY *Examinateurs*

M. CHABRILLAC

UNIV.
LEIDEN
BIBL.

2077

UNIVERSITE DE PARIS-SUD

CENTRE D'ORSAY

PERMIS D'IMPRIMER

Doctorat 3° CYCLE

Thèse de PHYSIQUE NUCLEAIRE option: Physique des Réacteurs

Nom GRANDOTTO-BIETTOLI

Prénoms Marc

Date et lieu de naissance 17 Octobre 1949 à NICE (Alpes-Maritimes)

SUJET :

Thèse : Autosecol: un calcul automatique de l'autoprotection des résonances des isotopes lourds.

Vu et approuvé :

Orsay, le 11 MAI 1976

Les Membres du Jury.

REMERCIEMENTS

Je remercie Monsieur le Professeur J. HOROWITZ, Directeur de l'Institut de Recherches Fondamentales, de m'avoir fait l'honneur d'accepter la direction de cette thèse.

Je remercie Monsieur le Professeur J. BUSSAC, Directeur à la Compagnie Internationale de Service en Informatique, pour le grand intérêt avec lequel il a suivi le déroulement de ce travail.

Je remercie Monsieur M. CHABRILLAC, Chef du Service d'Etudes de Réacteurs et de Mathématiques Appliquées, de m'avoir permis la réalisation de ce travail dans le cadre de son Service.

Je remercie Monsieur A. KAVENOKY, Chef de la Section de Physique Mathématique, dont les conseils, tant sur le plan de la théorie que sur le plan des applications ont été pour moi un enseignement du plus grand intérêt.

Je remercie mes camarades du groupe de Mathématiques Appliquées pour les discussions enrichissantes que j'ai eues avec eux, et pour leur sympathie toujours égale.

Je remercie Madame C. BONFILS, Mademoiselle J. CORONA et Madame C. DROUHOT d'avoir assuré la réalisation matérielle de cette thèse.

TABLE DES MATIERES

		Page
	REMERCIEMENTS	
	INTRODUCTION	1
1.	FORMALISME DU CALCUL DE L'AUTOPROTECTION DES RESONANCES	2
1.1.	Flux fondamental de structure fine - Taux de réaction effectifs	2
1.2.	Calcul multigroupe à pas larges	6
1.3.	Principe d'équivalence - Section équivalente	7
1.4.	Principe de la tabulation des taux de réaction effectifs et résolution du système d'équations multigroupes	8
2.	CALCUL DES SECTIONS EFFICACES DE BASE - THEORIE	10
2.1.	Domaine résolu	10
2.2.	Domaine non résolu	14
3.	MISE EN OEUVRE DE LA TABULATION DES TAUX DE REACTION EFFECTIFS : Le Système AUTOSECOL	18
3.1.	Calcul des sections efficaces de base : le programme AUTOCAR	18
3.2.	Calcul des taux de réaction effectifs - le programme AUTOSEC	21
3.3.	Exploitation de la tabulation	27
4.	TESTS ET APPLICATIONS DU SYSTEME AUTOSECOL	28
4.1.	Tests du système AUTOSECOL	28
4.2.	Tabulation et utilisation des taux de réaction effectifs du Hafnium	44
4.3.	Tabulation et tests des taux de réaction effectifs des isotopes Pu 239, Pu 240, et Pu 241 de l'évaluation ENDF/B-4.	51

Digitized by the Internet Archive
in 2026

https://archive.org/details/IA41548118_0006

				Page
			CONCLUSION	73
ANNEXE	1	:	Section équivalente et facteur de Bell	74
ANNEXE	2	:	Variation de l'intégrale effective en fonction de $1/\Sigma_e$	77
ANNEXE	3	:	Variation en température de l'intégrale effective	78
ANNEXE	4	:	Données ENDF	79
ANNEXE	5	:	Le système AUTOSECOL	80
ANNEXE	6	:	Taux de réaction effectifs des isotopes du Plutonium	88
ANNEXE	7	:	Autoprotection du Hafnium naturel	101
ANNEXE	8	:	Sections auto-protégées du Pu 240 dans le domaine thermique	104
			REFERENCES	105

INTRODUCTION

Dans un réacteur nucléaire la présence d'isotopes, dont les sections efficaces de réactions avec les neutrons présentent des résonances, implique une variation très rapide du flux neutronique avec l'énergie.

Pour résoudre ce problème M. Livolant et F. Jeanpierre ont développé un formalisme basé sur la séparation des deux types d'effets des résonances : les effets locaux en énergie qui créent une structure fine du flux et les effets globaux dont la résultante est une variation lente du flux [2][3].

Ce formalisme définit des taux de réaction effectifs, qui utilisées sous forme de tables dans un calcul multigroupe de cellule à pas large devant la largeur des résonances, permettent de tenir compte correctement des effets de la variation rapide du flux sur l'intégrale effective.

Ces tables sont utilisées pour prendre en compte ce phénomène d'autoprotection des résonances dans le programme Apollo de résolution multigroupe de l'équation du transport pour les neutrons [1].

Les tables de taux de réaction effectifs sont calculées à partir de données nucléaires de base et en fonction de paramètres liés à la situation physique de l'isotope résonnant dans le milieu combustible.

Les évaluations des données nucléaires évoluent dans le temps avec les nouvelles études ou expériences réalisées sur les propriétés des noyaux. Pour suivre cette évolution et disposer d'une bibliothèque nucléaire à jour pour un code de calcul, il est nécessaire de disposer d'un programme général, souple et rapide de calcul des taux de réactions effectifs.

Le but de ce travail est, partant du formalisme de M. Livolant et F. Jeanpierre, l'élaboration du programme AUTOSECOL de calcul de tables de taux de réaction effectifs utilisables par le programme APOLLO.

Nous rappelons d'abord dans la Section 1 le formalisme théorique de calcul des taux de réaction effectifs et dans la Section 2 les méthodes de calcul des sections efficaces de base à partir des données nucléaires.

Nous exposons ensuite dans la Section 3 la méthode développée pour réaliser l'ensemble du traitement, des données nucléaires jusqu'à la tabulation des taux de réaction effectifs.

Nous présentons enfin dans la Section 4 différents exemples d'application du programme AUTOSECOL à des isotopes résonnants présents dans les cellules des réacteurs étudiés actuellement.

1. FORMALISME DU CALCUL DE L'AUTOPROTECTION DES RESONANCES

Nous présentons ici le formalisme développé par M. Livolant et F. Jeanpierre pour le calcul de l'autoprotection des résonances [3].

1.1 *Flux fondamental de structure fine - Taux de réaction effectifs*

Le problème posé est le séparation d'un effet local des résonances induisant une structure fine du flux et d'un effet global résultant d'une variation moyenne du flux, en général décroissance du flux par absorption quand la léthargie croît.

Prenons le cas simple suivant, qui constituera néanmoins une bonne approximation susceptible de généralisation :

- Soit un réseau uniforme constitué de cellules identiques à deux milieux, un milieu combustible contenant un isotope à sections efficaces résonnantes et un ou plusieurs isotopes à sections constantes ou lentement variables mélangés à l'isotope résonnant, et un milieu modérateur contenant un ou plusieurs isotopes à sections constantes ou lentement variables.
- Dans l'hypothèse du choc isotrope et avec l'approximation du flux plat dans chacun des milieux, les équations pour le flux s'écrivent :

$$V_1(\Sigma_0+\Sigma_1)\,\Phi_1 = V_1\,P_{11}(R_0\,\Phi_1 + R_1\,\Phi_1) + V_2\,P_{21}\,R_2\,\Phi_2 \qquad (1)$$

$$V_2\,\Sigma_2\,\Phi_2 = V_1\,P_{12}(R_0\,\Phi_1 + R_1\,\Phi_1) + V_2\,P_{22}\,R_2\,\Phi_2 \qquad (2)$$

Avec les notations suivantes :

- Indice 0 pour l'isotope résonnant.
- Indice 1 pour le milieu combustible et pour les isotopes mélangés à l'isotope résonnant.
- Indice 2 pour le milieu modérateur et les isotopes qu'il contient.
- Σ_i section macroscopique totale du ou des isotopes i.
- V_i volume par cellule et par unité de hauteur du milieu i.
- R_i opérateur de ralentissement :

$$R_i\,\Phi_i = \int_{u-\varepsilon_i}^{u} \Sigma_{si}(u'\to u)\,\Phi_i(u')\,du'$$

- ε_i gain maximum de léthargie par choc.
- $\Sigma_{si}(u'\to u) = \Sigma_{si}(u')\,P(u'\to u)$ section de transfert.
- $\Sigma_{si}(u')$ section efficace macroscopique de diffusion élastique du ou des isotopes i (léthargie u').
- $P(u'\to u)$ probabilité de transfert en léthargie.
- P_{ij} probabilité pour un neutron né dans le milieu i de subir sa première collision dans le milieu j.

Nous avons la relation de réciprocité (en considérant les sections par milieu)

$$\Sigma_i V_i P_{ij} = \Sigma_j V_j P_{ji}$$

et la relation de conservation (sans fuite)

$$\sum_j P_{ij} = 1$$

La relation de réciprocité nous donne :

$$V_2 P_{21} = \frac{(\Sigma_0+\Sigma_1) V_1 P_{12}}{\Sigma_2}$$

et la relation de conservation : $P_{12} = 1 - P_{11}$,

L'équation (1) devient

$$(\Sigma_0+\Sigma_1) \Phi_1 = P_{11} R_0 \Phi_1 + P_{11} R_1 \Phi_1 + (\Sigma_0+\Sigma_1)(1-P_{11}) \psi \qquad (1.bis)$$

en posant $$\psi = \frac{R_2 \Phi_2}{\Sigma_2}$$

Pour définir une structure fine du flux associée à l'isotope résonnant nous définirons la fonction de Green $\phi(u,u_0)$ comme solution de :

$$(\Sigma_0+\Sigma_1) \phi(u,u_0) = P_{11} R_0 \phi(u,u_0) + P_{11} R_1 \phi(u,u_0) + (\Sigma_0+\Sigma_1)(1-P_{11}) \delta u_0 \qquad (3)$$

où δu_0 représente une source d'intensité unité localisée à la léthargie u_0.

En multipliant l'équation (3) par $\psi(u_0)$ et en intégrant sur u_0 de $-\infty$ à u nous obtenons :

$$(\Sigma_0+\Sigma_1) \int_{-\infty}^{u} du_0 \, \phi(u,u_0) \, \psi(u_0)$$

$$= P_{11} R_0 \int_{-\infty}^{u'} du_0 \, \phi(u',u_0) \, \psi(u_0) + P_{11} R_1 \int_{-\infty}^{u'} du_0 \, \phi(u',u_0) \, \psi(u_0) + (\Sigma_0+\Sigma_1)(1-P_{11}) \psi(u) \qquad (3.bis)$$

Nous déduisons des équations (1.bis) et (3.bis), l'équation suivante :

$$\Phi_1(u) = \int_{-\infty}^{u} du_0 \, \phi(u,u_0) \, \psi(u_0) \qquad (4)$$

Le flux Φ_2 a une structure fine, mais l'application de l'opérateur R_2 sur Φ_2 lisse fortement cette structure fine, l'intervalle d'intégration ε_2 étant d'un ordre de grandeur très supérieure aux largeurs des résonances, et $\Sigma_{s2}(u' \to u)$ étant une fonction régulière. La fonction $\psi(u)$ peut alors être considérée comme ayant une variation lente.

Nous pouvons faire la même remarque en ce qui concerne l'application de l'opérateur R_1 sur Φ_1 et les valeurs de ε_1 et $\Sigma_{s1}(u' \to u)$.

Compte tenu des remarques précédentes nous pouvons représenter ψ au premier ordre dans un intervalle entourant u, sous la forme :

$$\psi(u_0) = \psi(u) - (u-u_0)\,\psi'(u) \tag{5}$$

(4) et (5) donnent :

$$\Phi_1(u) = \psi(u)\,\phi_0(u) - \psi'(u)\,\phi_1(u) \tag{6}$$

avec

$$\phi_0(u) = \int_{-\infty}^{u} \phi(u,u_0)\,du_0 \tag{7}$$

$$\phi_1(u) = \int_{-\infty}^{u} \phi(u,u_0)(u-u_0)\,du_0 \tag{8}$$

La fonction ψ étant régulière l'équation (8) montre que la structure fine de Φ_1 est prise essentiellement en compte par ϕ_0.

On peut montrer également que dans les réacteurs thermiques usuels ϕ_1 peut être négligé, ce qui nous permet d'écrire :

$$\Phi_1(u) = \phi_0(u)\,\psi(u)$$

Il faut remarquer néanmoins que cette approximation ne pourrait pas, sans une étude plus approfondie, s'appliquer aux réacteurs rapides et aux isotopes résonnants légers (Fe, O, Ni, Na).

Par définition ϕ_0 sera le flux fondamental de structure fine pour l'isotope résonnant dans la géométrie considérée.

En intégrant l'équation (3) nous obtenons les équations vérifiées par $\phi_0(u)$ et $\phi_1(u)$:

$$(\Sigma_0+\Sigma_1)\,\phi_0(u) = P_{11}\,R_0\,\phi_0(u') + P_{11}\,R_1\,\phi_0(u') + (\Sigma_0+\Sigma_1)(1-P_{11}) \tag{9}$$

$$(\Sigma_0+\Sigma_1)\,\phi_1(u) = P_{11}\,R_0(\phi_1(u') + (u-u')\,\phi_0(u')) + P_{11}\,R_1(\phi_1(u') + (u-u')\,\phi_0(u')) \tag{10}$$

ou encore :

$$\frac{1}{N_0}\,R_0\,\phi_0 - (\sigma_0+\sigma_e)\,\phi_0 + \sigma_e = 0 \tag{11}$$

$$\frac{1}{N_0}\,R_0\,\phi_1 + \frac{1}{N_0}\,R_1\,\phi_1 - (\sigma_0+\sigma_e)\,\phi_1 + \frac{1}{N_0}\left[R_0[(u-u')\,\phi_0(u')] + R_1[(u-u')\,\phi_0(u')]\right] = 0 \tag{12}$$

en posant

$$\sigma_e = \frac{1}{N_0}\,\frac{\Sigma_1 + \Sigma_0(1-P_{11})}{P_{11}}$$

et

$$R_1\,\phi_0 = \Sigma_1$$

Remarque et définition :

Le flux fondamental de structure fine à associer à un isotope résonnant dans une région et pour une situation physique déterminée est le flux que l'on obtiendrait dans cette région si tous les autres isotopes étaient remplacés par des isotopes purement absorbants, de section d'absorption égale à leur section totale, auxquels seraient associées des sources isotropes d'intensité égale à cette même section totale.

L'équation (11) montre que ϕ_0 ne dépend de la géométrie et des autres isotopes en présence que par la fonction σ_e, appelée section équivalente, donc de la probabilité P_{11} qui, lorsque les sections des autres isotopes sont constantes et pour une géométrie donnée, ne dépend que de σ_0, section microscopique totale de l'isotope résonnant.

L'équation (11) est une équation de ralentissement en milieu infini avec absorption résonnante et source.

Une étude approximative pour ϕ_0 donne :

- entre les résonances $\Phi_0 = 1$
- en approximation résonance étroite $\left(\frac{1}{N_0} R_0 \phi_0 = \sigma_{p0}\right)$

$$\phi_0 = \frac{\sigma_{p0} + \sigma_e}{\sigma_0 + \sigma_e}$$

σ_{p0} étant la section potentielle de l'isotope résonnant,

- en approximation résonance large $\left(\frac{1}{N_0} R_0 \phi_0 = \sigma_{s0} \phi_0\right)$

$$\Phi_0 = \frac{\sigma_e}{\sigma_e + \sigma_e}$$

L'équation (11) est l'équation de base de toute la théorie des taux de réactions effectifs.

Pour une section quelconque $\sigma_r(u)$, dans un intervalle de léthargie $[u_1, u_2]$ suffisamment petit pour que la fonction ψ puisse être considérée comme linéaire dans cet intervalle, le taux de réaction effectif est défini par :

$$\sigma_{eff_r} = \frac{1}{u_2 - u_1} \int_{u_1}^{u_2} \sigma_r(u)\, \phi_0(u)\, du \qquad (13)$$

Ce taux de réaction effectif prend en compte pour la section considérée l'essentiel de la structure fine. Il dépend de la situation physique par l'intermédiaire de $\sigma_e(u)$.

Le taux de réaction est défini par :

$$T_r = \int_{u_1}^{u_2} \sigma_r(u)\ \phi_1(u)\ du \qquad (14)$$

On peut montrer qu'une bonne approximation consiste à écrire :

$$T_r = \psi(u_0)\ \sigma_{eff}\ \Delta u$$

avec : $\Delta u = u_2 - u_1$ et $u_0 = \dfrac{u_1 + u_2}{2}$

dans le cas des isotopes lourds, dans les réacteurs thermiques et si la largeur en léthargie des groupes utilisés est suffisamment petite (inférieure à 0.5).

Par définition l'intégrale effective est :

$$I_{eff} = \int_{u_0}^{u_{th}} \sigma_r(u)\ \phi_0(u)\ du$$

u_0 étant la léthargie correspondant à l'énergie maximum utile, u_{th} la léthargie correspondant à une coupure thermique déterminée.

1.2 *Calcul multigroupe à pas larges*

Etant donné une situation physique donnée contenant un isotope résonnant, il faut déterminer les sections à utiliser dans un calcul multigroupe de transport à pas larges devant la largeur des résonances pour obtenir des taux de réactions corrects.

Pour une géométrie quelconque un calcul multigroupe suffisamment fin devant la largeur des résonances, afin de prendre en compte les effets de structure fine du flux dans les résonances, donne des taux de réaction corrects.

L'idée principale du traitement sera donc de conserver les taux de réactions entre les deux calculs.

Avec les mêmes hypothèses que pour le calcul fin (choc isotrope et flux plat dans la zone contenant l'isotope résonnant), le flux multigroupe fondamental est solution du système d'équations multigroupes suivant :

(groupe ℓ)

$$\sum_{m=1}^{\ell} \sigma_{sm}\ \phi_{0m}\ P_{m\to\ell}\ \Delta u_m - \sigma_{t\ell}\ \phi_{0\ell} + \sigma_{e\ell}(1-\phi_{0\ell}) = 0 \qquad (15)$$

avec $\sigma_{sm\to\ell} = \sigma_{sm}\ P_{m\to\ell}$

La conservation des taux de réactions entre le calcul fin et le calcul à pas larges s'écrit :

$$\sigma_{s\ell}\,\phi_{0\ell} = (\sigma_{s\ eff})_\ell$$
$$\sigma_{t\ell}\,\phi_{0\ell} = (\sigma_{t\ eff})_\ell \qquad (16)$$

L'équation (15) s'écrit alors :

$$\phi_{0\ell} = 1 + \frac{\sum_{m=1}^{\ell} (\sigma_{s\ eff})_m\, P_{m\to\ell} - (\sigma_{t\ eff})_\ell}{\sigma_{e\ell}} \qquad (17)$$

La deuxième idée importante de ce traitement est de pouvoir traiter différentes géométries à l'aide simplement d'un calcul multigroupe à pas larges sans refaire dans chaque cas un calcul fin. Il faut donc que la conservation des taux de réactions entre le calcul à pas larges et le calcul fin puisse s'écrire indépendamment de leurs géométries respectives. Un calcul fin de référence dans une géométrie donnée déterminera alors les taux de réaction effectifs $(\sigma_{r\ eff})_\ell$ (réaction r) à utiliser dans les relations (16).

Les sections multigroupes $\sigma_{r\ell}$, appelées sections autoprotégées, sont donc définies comme étant les sections qui permettent de retrouver dans la situation physique fondamentale les mêmes taux de réactions pour l'isotope considéré dans le calcul multigroupe à pas larges et dans le calcul fin avec leurs géométries respectives.

Il s'agit donc maintenant d'établir une équivalence entre deux calculs afin de déterminer les sections effectives à utiliser dans les relations (16).

Auparavant nous pouvons remarquer que si l'on cherche une équivalence entre deux calculs, indépendamment de leurs géométries respectives, la solution la plus simple consiste à choisir comme géométrie du calcul fin de référence la géométrie homogène.

1.3 *Principe d'équivalence-section équivalente*

Les équations à résoudre dépendent de la géométrie par la section équivalente σ_e.

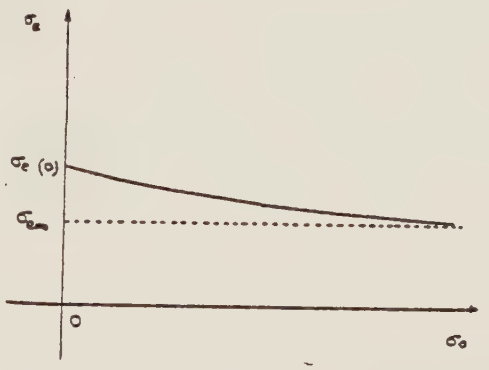
$$\sigma_e(\sigma_0) = \frac{\frac{\Sigma_1}{N_0} + \sigma_0(1-P_{11})}{P_{11}}$$

Dans le cas homogène qui nous intéresse pour le calcul de référence, σ_e ne dépend pas de l'énergie. En effet pour un isotope résonnant de section totale σ_0, de nombre de noyaux N_0, mélangé à un ou plusieurs isotopes non résonnants de section totale Σ_1 nous avons :

$$P_{11} = 1 \qquad \text{et} \qquad \sigma_e = \frac{\Sigma_1}{N_0}$$

Dans le cas hétérogène la section équivalente dépend de la géométrie considérée et dans les cas usuels sa variation en fonction de σ_0 est la suivante :

L'ensemble de la courbe se rapprochant de l'assymptote quand le caractère hétérogène diminue.



Le critère choisit pour la détermination de la section équivalente est la conservation des intégrales effectives dans les différents calculs [3]. Ce qui se justifie par le fait que la conservation des intégrales effectives est une condition nécessaire et pratiquement suffisante dans les réacteurs thermiques pour obtenir un facteur antitrappe correct.

Le principe d'équivalence consiste donc à définir une section équivalente correspondant à une géométrie hétérogène donnée de façon à obtenir la même intégrale effective dans cette géométrie et la géométrie homogène de référence [3].

Cette section équivalente est appelée section équivalente homogène vraie. L'ajustement des intégrales effectives est représenté par le facteur de Bell a.

On montre que pour un isotope résonnant d'indice 0, de concentration N_0, mélangé à d'autres isotopes de section totale Σ_1 dans un milieu physique d'indice 1, entouré par un milieu physique d'indice 2 géométriquement séparé du milieu 1 et contenant des isotopes de section totale Σ_2, on peut poser :

$$\sigma_{e_v} = \frac{1}{N_0} \left(\Sigma_1 + a\, \Sigma_{eG\infty}(\Sigma_2)\right)$$

$\Sigma_{eG\infty}$ étant la section équivalente infinie du milieu 2 pour l'ensemble du milieu 1.

Dans l'annexe 1 nous donnons un développement succint de la définition et du calcul du facteur de Bell.

1.4 *Principe de la tabulation des taux de réaction effectifs et résolution du système d'équations multigroupes*

1.4.1. *Tabulation*

En résolvant l'équation de structure fine en milieu infini et homogène nous calculons une table de taux de réaction effectifs en fonction du paramètre σ_e et de la température ; ce paramètre intervenant au niveau du calcul des sections efficaces.

1.4.2. Résolution

Le sous-programme Jezabel du programme APOLLO calcule un facteur de Bell a selon la méthode présentée au § 1.3 et décrite dans l'annexe 1.

Le sous-programme Bieff du programme APOLLO calcule une section équivalente homogène σ_{e_v} dans chaque groupe du calcul multigroupe. Il interpole dans la table des taux de réaction effectifs les valeurs qui lui sont nécessaires à la résolution du système des équations (16) et (17) par itération.

1.4.3. Remarque

La section équivalente homogène σ_{e_v} dépend de l'énergie alors que le paramètre σ_e du calcul homogène n'en dépend pas. La variation lente des taux de réaction effectifs en fonction de σ_e permet d'interpoler correctement entre des valeurs discrètes du paramètre σ_e pour lesquelles des taux de réaction effectifs auront été calculés.

Il est important de remarquer que les taux de réaction effectifs utilisés au niveau du calcul multigroupe large proviennent pour chaque groupe, compte tenu de l'interpolation, d'un calcul homogène de référence différent (c.a.d. d'un paramètre σ_e différent).

Le choix des valeurs du paramètre σ_e doit être tel que celles-ci représentent bien au sens de l'interpolation le domaine des valeurs possibles de σ_{e_v}.

L'expérience acquise dans les calculs de cellules usuelles pour des isotopes résonnants bien connus (isotopes fissiles et fertiles principalement) permet de se définir un ensemble de σ_e convenable.

Dans quelques cas particuliers ou nouveaux il peut s'avérer nécessaire de faire une étude préliminaire pour définir les valeurs de σ_e de la tabulation.

2. CALCUL DES SECTIONS EFFICACES DE BASE - THEORIE

Nous étudions ici le domaine des résonances résolues, où celles-ci sont bien séparées et observées expérimentalement (ou du moins sont évaluées comme telles), et le domaine des résonances non résolues, où seule une section lentement variable est observée, bien que la largeur totale des résonances soit inférieure à leur espacement. Ceci est la conséquence de la croissance de la résolution des appareils de mesure avec l'énergie ; cette résolution devient supérieure aux espacements des résonances dans le domaine non résolu.

2.1 *Domaine résolu*

2.1.1. *Formalisme Breit Wigner multiniveau , sans effet Doppler* [4]

E : énergie dans le laboratoire du neutron incident (eV).

$\sigma_t(E)$: section efficace totale à l'énergie E.

$\sigma_{nn}(E)$: section efficace de diffusion à l'énergie E.

ℓ : moment angulaire du neutron incident.

$\sigma^{\ell}_{nn}(E)$: section efficace de diffusion à l'énergie E pour un moment angulaire ℓ du neutron incident.

$\sigma_{ni}(E)$: section efficace pour la réaction i à l'énergie E - i = γ pour la capture radiative.
i = f pour le fission.

$\sigma^{\ell}_{ni}(E)$: section efficace pour la réaction i à l'énergie E pour un moment angulaire ℓ du neutron incident.

$$\sigma_{nx}(E) = \sum_{\ell} \sigma^{\ell}_{nx}(E) \quad ; \quad x = n, \gamma \text{ ou } f.$$

$$\sigma_t(E) = \sum_{x} \sigma_{nx}(E).$$

A : masse du noyau rapportée à celle du neutron (u.m.a.)

k : nombre d'onde du neutron incident.

$$k = 2.19685 \frac{A}{A+1} \; 10^{-3} \sqrt{E} \; ;$$

$$\lambda\!\!\!^{-} = \frac{\lambda}{2\pi} = \frac{1}{k} .$$

a : rayon de diffusion du noyau cible.

$$a = 0.123 \, A^{1/3} + 0.08 \quad (10^{-12} \text{ cm})$$

$$\rho = k\,a.$$

ϕ_{ℓ} : déphasage dans l'onde ℓ.

$$\phi_0 = \rho$$

$$\phi_1 = \rho - \text{arctg } \rho$$

$$\phi_2 = \rho - \text{arctg } \frac{3}{3 - \rho^2}$$

σ_p^ℓ : section potentielle, onde ℓ.

$$\sigma_p^\ell = (2\ell+1)\, 4\pi\, \lambda\!\!\!^{-2} \sin^2 \phi_\ell \qquad (18)$$

I : spin du noyau cible.

J : moment angulaire total (spin du noyau composé).

g_J : facteur statistique

$$g_J = \frac{2J+1}{2(2I+1)}$$

Pour une résonance r à l'énergie E_r (eV) nous définissons :

$\Gamma_{nr}^{\ell J}$: largeur neutronique à l'énergie E_r pour un neutron incident de moment angulaire ℓ et un spin J de la voie d'entrée.

$\Gamma_n^{\ell J}$: largeur neutronique à l'énergie E.

$\Gamma_{fr}^{\ell J}$: largeur de fission.

$\Gamma_{\gamma r}^{\ell J}$: largeur de capture radiative.

$\Gamma_r^{\ell J}$: largeur totale à l'énergie E_r.

$\Gamma^{\ell J}$: largeur totale à l'énergie E.

$$\Gamma_r^{\ell J} = \Gamma_{nr}^{\ell J} + \Gamma_{\gamma r}^{\ell J} + \Gamma_{fr}^{\ell J} \quad .$$

$$\Gamma^{\ell J} = \Gamma_n^{\ell J} + \Gamma_\gamma^{\ell J} + \Gamma_f^{\ell J} \quad .$$

$N_{res}^{\ell J}$: nombre de résonances par valeur de ℓ et de J.

Les sections s'écrivent :

$$\sigma_{nn}^\ell(E) = \sigma_p^\ell + \pi\, \lambda\!\!\!^{-2} \sum_J g_J \left[\sum_{r=1}^{N_{res}^{\ell J}} \frac{(\Gamma_n^{\ell J})^2 \cos 2\phi_\ell - 2\, \Gamma_n^{\ell J}\, \Gamma^{\ell J} \sin^2 \phi_\ell + 2(E-E_r)\, \Gamma_n^{\ell J} \sin 2\phi_\ell}{(E-E_r)^2 + \frac{1}{4}(\Gamma^{\ell J})^2} \right.$$

$$\left. + \sum_{r=2}^{N_{res}^{\ell J}} \sum_{s=1}^{r-1} \frac{2\, \Gamma_{n(r)}^{\ell J}\, \Gamma_{n(s)}^{\ell J} \left[(E-E_r)(E-E_s) + \frac{1}{4}\, \Gamma_{(r)}^{\ell J}\, \Gamma_{(s)}^{\ell J} \right]}{\left[(E-E_r)^2 + \frac{1}{4}(\Gamma_{(r)}^{\ell J})^2 \right] \left[(E-E_s)^2 + \frac{1}{4}(\Gamma_{(s)}^{\ell J})^2 \right]} \right] \qquad (19)$$

$$\sigma_{ni}^\ell(E) = \pi\, \lambda\!\!\!^{-2} \sum_J g_J \sum_{r=1}^{N_{res}^{\ell J}} \frac{\Gamma_n^{\ell J}\, \Gamma_{ir}^{\ell J}}{(E-E_r)^2 + \frac{1}{4}(\Gamma^{\ell J})^2} \qquad (20)$$

$P_\ell(E)$: facteur de pénétration à l'énergie E.

$$P_0 = \rho \quad ; \quad P_1 = \frac{\rho^3}{1-\rho^2}$$

$$\Gamma_n^{\ell J}(E) = \Gamma_{nr}^{\ell J} \frac{P_\ell(E)}{P_\ell(E_r)}$$

2.1.2. Approximations

Le terme d'interférence entre les résonances peut être négligé dans les cas les plus courants. C'est ce que nous ferons ici en nous ramenant à un formalisme à un niveau.

Dans le domaine des résonances $E << \frac{10.6}{A^{2/3}}$ (Mev) et $\phi_0 << 1$; ϕ_1 est négligeable devant ϕ_0. Ceci nous permet d'écrire :

$$\sin 2\phi_0 \simeq 2\phi_0 = 2ka$$

$$\cos 2\phi_\ell \simeq 1.$$

Nous négligeons également le terme d'interférence "résonnant-potentiel" pour les ondes "p" et le terme symétrique de ce terme d'interférence pour les ondes "s".

Nous écrivons alors les sections de diffusion :

$$\sigma_{nn}^0(E) = \sigma_p^0 + \pi \lambda^2 \sum_J g_J \sum_r \frac{(\Gamma_n^{0J})^2}{(E-E_r)^2 + \frac{1}{4}(\Gamma^{0J})^2} - 4\pi a \lambda \sum_J g_J \sum_r \frac{\Gamma_n^{0J}(E-E_r)}{(E-E_r)^2 + \frac{1}{4}(\Gamma^{0J})^2} \qquad (21)$$

$$\sigma_{nn}^1(E) = \sigma_p^1 + \pi \lambda^2 \sum_J g_J \sum_r \frac{(\Gamma_n^{1J})^2}{(E-E_r)^2 + \frac{1}{4}(\Gamma^{1J})^2} \qquad (22)$$

2.1.3. Dépendance en énergie des largeurs neutroniques

2.1.3.1. Onde "s"

$$P_0(E) = \rho = ka = \alpha\sqrt{E}$$

$$\Gamma_n^{0J}(E) = \Gamma_{nr}^{0J}\sqrt{\frac{E}{E_r}}$$

2.1.3.2. Onde "p"

$$P_1(E) = \frac{\rho^3}{\rho^2 + 1}$$

Dans le domaine d'énergie étudié nous avons $\rho^2 << 1$ c'est-à-dire $P_1(E) \simeq \rho^3 = \alpha E^{3/2}$

$$\Gamma_n^{1J} = \Gamma_{nr}^{1J}\left(\frac{E}{E_r}\right)^{3/2}$$

2.1.4. *Sections efficaces avec approximation*

Soit Γ_r^J la section efficace de formation du noyau composé à l'énergie E_r :

$$\sigma_r^J = 4\pi \lambda_r^2 g_J \frac{\Gamma_{nr}^{\ell J}}{\Gamma_r^{\ell J}}$$

Posons :

$$X = \frac{2(E-E_r)}{\Gamma^{\ell J}}$$

Les sections s'écrivent :

$$\sigma_{nn}^0(E) = \sigma_p^0 + \sum_J \sum_r \frac{\sigma_r^J}{1+X^2} \frac{\Gamma_r^{0J}}{(\Gamma^{0J})^2} \Gamma_{nr}^{0J} + 2\,k\,a \sum_J \sum_r \sigma_r^J \frac{X}{1+X^2} \sqrt{\frac{E_r}{E}} \frac{\Gamma_r^{0J}}{\Gamma^{0J}} \qquad (23)$$

$$\sigma_{ni}^0(E) = \sum_J \sum_r \frac{\sigma_r^J}{1+X^2} \sqrt{\frac{E_r}{E}} \frac{\Gamma_r^{0J}}{(\Gamma^{0J})^2} \Gamma_{ir}^{0J} \qquad (24)$$

$$\sigma_{nn}^1(E) = \sigma_p^1 + \sum_J \sum_r \frac{\sigma_r^J}{1+X^2} \left(\frac{E}{E_r}\right)^2 \frac{\Gamma_r^{1J}}{(\Gamma^{1J})^2} \Gamma_{nr}^{1J} \qquad (25)$$

$$\sigma_{ni}^1(E) = \sum_J \sum_r \frac{\sigma_r^J}{1+X^2} \sqrt{\frac{E}{E_r}} \frac{\Gamma_r^{1J}}{(\Gamma^{1J})^2} \Gamma_{ir}^{1J} \qquad (26)$$

2.1.5. *Effet Doppler*

Les noyaux cibles étant soumis au phénomène de l'agitation thermique, nous tenons compte de leur distribution en énergie par une maxwellienne, et en considérant leur énergie faible devant celle du neutron, nous avons :

$$\sigma_{nn}^0(E) = \sigma_p^0 + \sum_J \sum_r \sigma_r^J \frac{\Gamma_r^{0J}\,\Gamma_{nr}^{0J}}{(\Gamma^{0J})^2} \psi(\beta,X) + 2\,ka \sum_J \sum_r \sigma_r^J \sqrt{\frac{E_r}{E}} \frac{\Gamma_r^{0J}}{\Gamma^{0J}} \Phi(\beta,X) \qquad (27)$$

$$\sigma_{ni}^0(E) = \sum_J \sum_r \sigma_r^J \sqrt{\frac{E_r}{E}} \frac{\Gamma_r^{0J}\,\Gamma_{ir}^{0J}}{(\Gamma^{0J})^2} \psi(\beta,X) \qquad (28)$$

$$\sigma_{nn}^1(E) = \sigma_p^1 + \sum_J \sum_r \sigma_r^J \left(\frac{E}{E_r}\right)^2 \frac{\Gamma_r^{1J}\,\Gamma_{nr}^{1J}}{(\Gamma^{1J})^2} \psi(\beta,X) \qquad (29)$$

$$\sigma_{ni}^1(E) = \sum_J \sum_r \sigma_r^J \sqrt{\frac{E}{E_r}} \frac{\Gamma_r^{1J}\,\Gamma_{ir}^{1J}}{(\Gamma^{1J})^2} \psi(\beta,X) \qquad (30)$$

Avec les définitions suivantes :

$$\beta = \frac{2\,\Delta}{\Gamma^{\ell J}} \quad ; \quad \Delta = 2\sqrt{\frac{kTE}{A}} \quad ;$$

Δ est la largeur Doppler, k la constante de Boltzmann, T la température en dégré K.
$k = 8.6167\ 10^{-5}$ eV.(°K)$^{-1}$

$$\psi(\beta,X) = \frac{1}{\beta\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{1+y^2} \exp\left[-\frac{(X-Y)^2}{\beta}\right] dy \qquad (31)$$

$$\Phi(\beta,X) = \frac{1}{\beta\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{y}{1+y^2} \exp\left[-\frac{(X-Y)^2}{\beta}\right] dy \qquad (32)$$

2.2 *Domaine non résolu*

2.2.1. *Sections efficaces moyennes*

Notation :

$\lambda = \frac{1}{k}$; k : nombre d'onde du neutron incident.

g_J : facteur statistique.

$\Gamma_i^{\ell J}$: largeur moyenne de résonance dans la réaction i, spin J, moment angulaire ℓ.

$\Gamma^{\ell J} = \sum_i \Gamma_i^{\ell J}$: largeur moyenne totale.

E_r : énergie de la résonance r (eV).

$N_{\ell J}$: nombre de résonances de spin J, de moment angulaire ℓ.

$< D_J >_\ell$: espacement moyen des résonances (eV).

ϕ_ℓ : déphasage dans l'onde ℓ.

E : énergie dans le laboratoire du neutron incident (eV).

Moyennons les sections efficaces données par un formalisme Breit Wigner à un niveau dans un intervalle Δ E tel que $\Delta E >> D_{\ell J}$ et $\Gamma_n(E)$ et J variant peu sur Δ E.

La section efficace potentielle dépendant peu de l'énergie nous avons :

$$< \sigma_p^\ell > = \sigma_p^\ell$$

La partie résonnante de la section de diffusion se moyenne comme suit :

$$< \sigma_{n\ rés} >_\ell = \pi \lambda^2 \sum_J g_J \sum_r \frac{(\Gamma_n^{\ell J})^2}{\Delta E} \int_{E_r - \Delta E_1}^{E_r + \Delta E_2} \frac{dE}{(E-E_r)^2 + \frac{1}{4}(\Gamma^{\ell J})^2}$$

avec $\Delta E = \Delta E_1 + \Delta E_2$.

En posant $X = \frac{2(E-E_r)}{\Gamma^{\ell J}}$ l'intégrale précédente devient :

$$\frac{2}{\Gamma^{\ell J}} \int_{-\frac{2\ \Delta E_1}{\Gamma^{\ell J}}}^{+\frac{2\ \Delta E_2}{\Gamma^{\ell J}}} \frac{dX}{1 + X^2}$$

Avec $D << \Delta E$ et comme $\frac{\Gamma}{D} < 1$, dans le domaine non résolu nous pouvons prendre $\frac{2\ \Delta E_2}{\Gamma^{\ell J}} \simeq \infty$ et $-\frac{2\ \Delta E_1}{\Gamma^{\ell J}} \simeq -\infty$.

L'intégrale devient :

$$\frac{2}{\Gamma^{\ell J}} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dX}{1 + X^2} = \frac{2}{\Gamma^{\ell J}} \left[\text{arctg } X \right]_{-\infty}^{+\infty} = \frac{2\pi}{\Gamma^{\ell J}}$$

Comme nous avons $\Delta E = N_{\ell J} < D_J >_\ell$, nous obtenons

$$< \sigma_{n\ rés} >_\ell = 2\pi^2 \lambda^2 \sum_J g_J \frac{1}{N_{\ell J} < D_J >_\ell} \sum_r \frac{(\Gamma_n^{\ell J})^2}{\Gamma^{\ell J}}$$

Nous avons encore :

$$\frac{1}{N_{\ell J}} \sum_r \frac{(\Gamma_n^{\ell J})^2}{\Gamma^{\ell J}} = < \frac{\Gamma_n^{\ell J}\ \Gamma_n^{\ell J}}{\Gamma^{\ell J}} >$$

D'où :

$$< \sigma_{n\ rés} >_\ell = 2\pi^2 \lambda^2 \sum_J \frac{g_J}{< D_J >_\ell} < \frac{\Gamma_n^{\ell J}\ \Gamma_n^{\ell J}}{\Gamma^{\ell J}} >$$

Le terme d'interférence symétrique de la formule de Breit Wigner à un niveau donne :

$$< \sigma_{n\ sym} >_\ell = - 4\pi^2 \lambda^2 \sum_J \frac{g_J}{< D_J >_\ell} \sin^2 \phi_\ell\ \Gamma_n^{\ell J}$$

Le terme d'interférence assymétrique conduit à l'intégrale suivante :

$$\int_{-\frac{2\ \Delta E_1}{\Gamma^{\ell J}}}^{+\frac{2\ \Delta E_2}{\Gamma^{\ell J}}} \frac{X\ dX}{1 + X^2} \simeq \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{X\ dX}{1 + X^2} = 0$$

c'est-à-dire $< \sigma_{n\ assym} >_\ell = 0$.

Finalement nous avons :

$$< \sigma_{nn} >_\ell = \frac{K}{E} \sum_J \frac{g_J}{< D_J >_\ell} \left[< \frac{\Gamma_n^{\ell J} \Gamma_n^{\ell J}}{\Gamma^{\ell J}} > - 2 \Gamma_n^{\ell J} \sin^2 \phi_\ell \right] + \sigma_p^\ell \qquad (33)$$

avec $K = 2\pi^2 \lambda^2 E$.

Le calcul pour les réactions i (capture, fission) est le même que celui du terme résonnant de la diffusion, ce qui nous donne :

$$< \sigma_{ni} >_\ell = \frac{K}{E} \sum_J \frac{g_J}{< D_J >_\ell} < \frac{\Gamma_n^{\ell J} \Gamma_i^{\ell J}}{\Gamma^{\ell J}} > \qquad i = \gamma, f \qquad (34)$$

Les valeurs moyennes se calculent sous la forme :

$$< \frac{\Gamma_n^{\ell J} \Gamma_i^{\ell J}}{\Gamma^{\ell J}} > = \frac{\Gamma_n^{\ell J} \Gamma_i^{\ell J}}{\Gamma^{\ell J}} R_{ni}^{\ell J} \qquad (35)$$

$R_{ni}^{\ell J}$ étant le facteur de fluctuation de la voie i, $\Gamma_n^{\ell J}$ et $\Gamma_f^{\ell J}$ suivent une loi statistique du χ^2 pour un nombre de degrés de liberté donné . $\Gamma_\gamma^{\ell J}$ est une distribution du type δ correspondant à une loi du χ^2 pour un nombre de degrés de liberté très grand.

Les termes $< \frac{\Gamma_n^{\ell J} \Gamma_i^{\ell J}}{\Gamma^{\ell J}} >$ sont calculés par la méthode de Greebler et Hutchins [7].

2.2.2. *Construction de résonances dans un échantillon*

Afin de calculer un facteur d'autoprotection dans un échantillon nous sommes amenés à construire des pseudo-résonances par un tirage au hasard de paramètres de résonance sur lesquels nous appliquons un formalisme Breit-Wigner [2][9].

2.2.2.1. Distribution des largeurs

Les largeurs Γ_f, Γ_γ et Γ_n^0 (largeur neutronique réduite) sont réparties selon une distribution suivant une loi du χ^2.

Pour une voie α et ν degrés de liberté, en posant $X = \frac{\Gamma_\alpha}{< \Gamma_\alpha >}$ et $\rho = \frac{\nu}{2}$, nous avons :

$$P(X,\rho) = \frac{\rho}{\Gamma(\rho)} (\rho X)^{\rho-1} e^{-\rho X} \qquad (36)$$

$$\Gamma(\rho) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-t} t^{\rho-1} dt$$

2.2.2.2. Distribution des espacements

La loi de Wigner donne la distribution des espacements des niveaux :

$$t = \frac{D}{< D >} \quad ; \quad Q(t) = \frac{\pi}{2} t \, e^{-\frac{\pi}{2} t^2} \tag{37}$$

2.2.2.3. Tirage au hasard

Pour la capture radiative ν est très grand. La loi du χ^2 tend vers une distribution de Dirac. Nous avons $\Gamma_\gamma = < \Gamma_\gamma >$.

Pour Γ_n^0 nous avons $\nu = 1$, soit la loi de Porter-Thomas :

$$P(X) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{\sqrt{X}} e^{-\frac{X}{2}} \tag{38}$$

Pour Γ_f nous avons généralement $\nu = 2$ et parfois $\nu = 1$ ou 3.

Si nous tirons un nombre ξ au hasard uniformément dans l'intervalle [0, 1] :

$$p(\xi) = 1 \quad ; \quad 0 \leq \xi \leq 1$$

nous obtenons la valeur de $X = \frac{\Gamma_\alpha}{< \Gamma_\alpha >}$ en résolvant l'équation :

$$\int_0^\xi p(z)\, dz = \xi = \frac{\rho}{\Gamma(\rho)} \int_0^X (\rho\, y)^{\rho-1} e^{-\rho\, y}\, dy \tag{39}$$

et la valeur de $t = \frac{D}{< D >}$ en résolvant l'équation :

$$\xi = \int_0^t \frac{\pi}{2} z \, e^{-\frac{\pi}{4} z^2} \, dz \tag{40}$$

3. MISE EN OEUVRE DE LA TABULATION DES TAUX DE REACTION EFFECTIFS - LE SYSTEME AUTOSECOL

Il s'agit d'obtenir pour un isotope donné les taux de réaction effectifs de diffusion, absorption et production, fonctions de la température et de la section équivalente sur un maillage utilisé par le programme APOLLO. L'ensemble de ces opérations constituent une tabulation.

Le système AUTOSECOL a été écrit dans le but de résoudre ce problème dans son ensemble d'une façon automatique.

Le calcul est principalement constitué de deux parties, l'une concernant le calcul des sections efficaces de base, l'autre concernant le calcul des taux de réaction effectifs.

Le système AUTOSECOL est composé de deux programmes. Le programme AUTOCAR qui réalise la première partie et le programme AUTOSEC qui réalise la seconde. Le lien entre les deux parties est assuré par un support intermédiaire de données, l'enchaînement étant automatique.

3.1 *Calcul des sections efficaces de base, le programme AUTOCAR*

Partant de données nucléaires de base (bande ENDF), le programme AUTOCAR construit un maillage, et calcule les sections efficaces sur ce maillage par un formalisme Breit Wigner à un niveau en tenant compte de l'effet Doppler.

3.1.1. *Construction du maillage*

Nous définissons deux types de maillage :

3.1.1.1. Le macromaillage

C'est le maillage de sortie des sections effectives. Constituant une donnée du programme son choix est libre. A partir des données de la bande ENDF le programme détermine les groupes du macromaillage utiles aux domaines résolu et non résolu de l'isotope traité.

3.1.1.2. Le maillage fin

Ce maillage est initialement ponctuel, puis est transformé en un maillage multigroupe par une intégration du type Simpson sur 3 points.

La construction de ce maillage fin en fonction des paramètres de résonance donnés par la bande ENDF est réalisée par le programme de façon à obtenir une bonne représentation des résonances sur lesquelles nous devons avoir une densité de points plus grande que dans les zones hors résonance.

Le principe consiste à se donner deux quantités qui permettent la détermination du maillage fin sur la zone résonnante. Ces deux quantités sont le nombre de points estimés né-

cessaire à la description d'une résonance et le nombre de points représentant la section entre les résonances.

Le programme détermine un pas de base ; tous les autres groupes du maillage fin étant ensuite des multiples de cette valeur. Cette condition est nécessaire au calcul de ralentissement dans la deuxième phase de la tabulation.

Le pas de base est déterminé par le nombre de points décrivant la résonance la plus étroite. Nous éliminerons dans ce critère les résonances ayant une contribution négligeable à l'intégrale de résonance du domaine de calcul. Cette élimination est réalisée en tenant compte du rapport des contributions de chaque résonances sur la contribution la plus grande. Ce rapport estune donnée du programme. Ceci permet d'obtenir une optimisation du calcul Breit Wigner pour des isotopes dont l'effet de la structure résonnante des sections efficaces sur un calcul de cellule est bien connu physiquement (dans le cas du Pu240, par exemple, la résonance à 1 eV représente la majeure partie de la contribution malgré l'existence de 201 résonances dans l'évaluation ENDF/B.4).

Le programme détermine ensuite les zones énergétiques contenant des résonances et répartit le nombre de points désirés sur chaque résonance en s'ajustant sur un multiple du pas de base. Il en est de même pour les zones hors résonance avec une autre valeur du nombre de points.

Cette phase conditionne la représentation de la structure résonnante d'un isotope et donc la précision de la détermination de la structure fine au niveau du calcul de ralentissement.

Un maillage fin est construit pour chaque macrogroupe. L'intérêt de ce dernier point réside dans le fait que le programme AUTOCAR traite séparément des zones énergétiques de la taille des macrogroupes et que l'encombrement-mémoire du programme en est donc considérablement réduit.

3.1.2. *Calcul des sections*

Nous appliquons le formalisme Breit Wigner sur le maillage fin ponctuel et nous en déduisons les sections efficaces de base sur le maillage multigroupe fin. Ces sections sont directement utilisables pour la suite du calcul.

Les sections sont calculées en fonction de la température pour tenir compte de l'effet Doppler. Le programme AUTOCAR calcule les sections efficaces de base pour plusieurs températures simultanément.

Les temps de calcul de ce programme dépendent essentiellement du calcul Breit Wigner avec effet Doppler. Nous avons adapté le calcul des fonctions $\psi(X,\beta)$ et $\Phi(X,\beta)$ des équations (27)(28)(29)(30) à l'usage précis qui en est fait dans ce cas afin de rendre le calcul plus rapide.

On remarque notamment que seul le paramètre β des fonctions ψ et Φ varie avec la température. Aussi ne calcule-t'on qu'une seule fois pour toutes les températures, les termes des développements des fonctions ψ et Φ où seul le paramètre X intervient.

3.1.3. *Cas du domaine non résolu*

Les évaluations donnent seulement les valeurs moyennes des paramètres de résonance dans le domaine non résolu.

Le programme utilise ces paramètres moyens pour calculer les sections efficaces moyennes de diffusion, absorption et fission sur les macrogroupes utiles au domaine non résolu par la méthode décrite au § 2.2.1.

Afin d'effectuer un calcul d'autoprotection il est nécessaire d'avoir une structure résonnante. Le programme utilise la méthode du tirage au hasard décrite au § 2.2.2. pour construire des pseudo-résonances.

L'emploi du calcul Breit Wigner, du fait de la densité des résonances dans le domaine non résolu, nous conduit à construire des résonances sur quelques zones énergétiques limitées appelées échantillons.

Le but est de calculer des facteurs d'autoprotections sur les échantillons et de les interpoler linéairement. La définition complète de ces échantillons (largeur, position, nombre) se fait à l'aide des critères suivants :

3.1.3.1. Répartition des échantillons sur le domaine

L'observation de la courbe de variation des facteurs d'autoprotection avec l'énergie nous indique que son rayon de courbure diminue avec l'énergie. Ceci conduirait à faire varier l'espacement des échantillons avec l'énergie. En fait cette variation est suffisamment faible et nous ne connaissons pas quantitativement cette variation au moment de la construction des pseudo-résonances. Dans le but d'automatiser le choix des échantillons nous avons été conduit à les répartir uniformément sur l'ensemble du domaine non résolu.

3.1.3.2. Nombre d'échantillons

Pour déterminer le nombre d'échantillons nous avons été guidés par les expériences des tabulations effectuées précédemment [2][5][10][11]. Bien qu'il n'y ait pas vraiment de règle générale, en dehors de la précision de l'interpolation, nous pouvons remarquer que le nombre d'échantillons varie peu (4 à 7) suivant les isotopes étudiés et qu'il n'est pas proportionnel à la largeur du domaine non résolu. La dépendance en fonction de cette largeur est faible, le facteur d'autoprotection ayant une variation régulière sur l'ensemble du domaine non résolu.

Le programme choisi 5 échantillons indépendamment de l'isotope traité. Nous avons toujours la possibilité de modifier cette valeur dans un cas particulier.

3.1.3.3. Largeur de l'échantillon

Nous disposons pour ce choix d'un critère simple. La largeur d'un échantillon est fonction de l'espacement moyen des résonances, donné par les évaluations, et doit permettre de retrouver la même valeur sur l'échantillon de la section moyenne calculée d'une part directement à partir des paramètres moyens, d'autre part en moyennant la section résonnante calculée par un formalisme Breit Wigner appliqué aux pseudo-résonances construites dans l'échantillon pour chaque valeur du moment angulaire ℓ.

Etant donné l'importance des calculs nécessaires il serait fastidieux d'utiliser ce principe dans un système itératif en cours de tabulation.

Les expériences précédentes de ces calculs montrent que la condition de validité de la statistique décrite ci-dessus est réalisée pour le tirage de 40 résonances environ par valeur de ℓ [5].

3.1.3.4. Résonances "p"

Les résonances "p" étant beaucoup plus nombreuses que les résonances "s" nous remarquons que le tirage de 40 résonances "s" implique le tirage de 80 à 120 résonances "p" selon les cas (U235, Pu239 et U238) ce qui alourdit excessivement le calcul en rapport de la faible contribution des résonances "p" à l'autoprotection [2][5].

Pour ces raisons nous ne considérons que les résonances "s" dans les échantillons.

Le tirage statistique des paramètres de résonance étant effectué, la construction du maillage et le calcul des sections efficaces sur un échantillon sont réalisés par le programme comme dans un macrogroupe du domaine résolu.

Les valeurs du paramètre température de ces calculs sont indiqués dans l'annexe 3.

3.2 Calcul des taux de réaction effectifs - Le programme AUTOSEC

Nous connaissons les sections efficaces de base calculées par le programme AUTOCAR. Le programme AUTOSEC est conçu pour enchaîner automatiquement le calcul des taux de réaction effectifs sur la structure des résultats du programme AUTOCAR.

Dans le domaine résolu le programme résoud l'équation de ralentissement (11) sur chaque macrogroupe en descendant l'axe des énergies. En plus du macrogroupe de départ le calcul ne nécessite simultanément que l'utilisation des macrogroupes dont les énergies peuvent être atteintes par ralentissement élastique des neutrons ayant leur origine dans le macrogroupe de départ.

La largeur en léthargie des macrogroupes utilisés généralement est au moins de l'ordre de 0.1 et la valeur du gain maximum de léthargie par choc des isotopes étudiés est de l'ordre de 0.01 à 0.03. Deux macrogroupes sont alors simultanément utiles au calcul.

Le programme calcule les taux de réaction effectifs sur les macrogroupes du domaine résolu.

Dans le domaine non résolu le programme AUTOSEC résoud l'équation de structure fine (11) sur chaque échantillon, calcule des facteurs d'autoprotection, les interpole et calcule enfin les taux de réaction effectifs sur les macrogroupes du domaine non résolu.

Le principal paramètre de ce calcul est la section équivalente σ_e. Le programme AUTOSEC traite simultanément un nombre quelconque de valeurs de σ_e.

Le programme AUTOSEC écrit enfin les résultats sous une forme utilisable ultérieurement.

3.2.1. *Domaine résolu*

A partir des sections efficaces sur le maillage fin du domaine résolu nous résolvons l'équation de structure fine (11) en fonction du paramètre σ_e.

Cette équation de ralentissement en milieu infini homogène se discrétise de la façon suivante (groupe ℓ) :

$$\sum_{m=1}^{\ell} \sigma_{sm}\, \phi_{0m}\, P^{m\to\ell}\, \Delta u_m - (\sigma_{s\ell} + \sigma_{a\ell} + \sigma_e)\, \phi_\ell + \sigma_e = 0 \qquad (41)$$

Posons :

$$S^{m\ell} = \sigma_{sm}\, \phi_{0m}\, P^{m\to\ell}\, \Delta u_m \quad ; \quad S^{\ell} = \sum_{m=1}^{\ell-1} S^{m\ell} \qquad (42)$$

L'équation (41) s'écrit :

$$S^{\ell} + \sigma_{s\ell}\, P^{\ell\to\ell}\, \Delta u_\ell\, \phi_{0\ell} - (\sigma_{s\ell} + \sigma_{a\ell} + \sigma_e)\, \phi_{0\ell} + \sigma_e = 0 \qquad (43)$$

ou encore

$$\phi_{0\ell} = \frac{S^{\ell} + \sigma_e}{\sigma_{a\ell} + \sigma_e + \sigma_{s\ell}(1 - P^{\ell\to\ell}\, \Delta u_\ell)} \qquad (44)$$

Le terme $P^{m\to\ell}(P(u'\to u))$ est calculé sous la forme :

$$P(v)\, dv = \frac{e^{-v}}{1-\alpha}\, dv \quad ; \quad v = u' - u \quad ; \quad \alpha = \left[\frac{A-1}{A+1}\right]^2 \qquad (45)$$

A est la masse du noyau rapportée à celle du neutron.

Ce calcul dépend seulement de la valeur de A et s'étend sur une largeur en léthargie ε ($\varepsilon = \ln \frac{1}{\alpha}$), gain maximum de léthargie par choc. Nous calculons un bloc, à pas élémentaire constant u, des probabilités de ralentissement élastique de la façon suivante.

3.2.1.1. Cas du premier groupe

Nous calculons la probabilité pour un neutron de léthargie comprise dans l'intervalle [0,u] avant le choc d'avoir une léthargie après le choc comprise dans le même intervalle :

$$P_1 = \frac{1}{(1-\alpha)\,u} \int_0^u du' \int_{u'}^u e^{-(u''-u')}\, du'' \qquad (46)$$

$$= \frac{1}{(1-\alpha)\,u} \int_0^u du' \int_0^{u-u'} e^{-v}\, dv$$

$$= \frac{1}{(1-\alpha)\,u} (u - 1 + e^{-u}) \qquad (47)$$

3.2.1.2. Cas des groupes i dont la léthargie limite est inférieure ou égale à ε

Nous calculons la probabilité pour un neutron de léthargie comprise dans l'intervalle [0,u] avant le choc d'avoir une léthargie après le choc comprise dans l'intervalle [(i-1) u, i.u]

$$P_i = \frac{1}{(1-\alpha)\,u} \int_0^u du' \int_{(i-1)u}^{i.u} e^{-(u''-u')}\, du'' \qquad (48)$$

$$= \frac{1}{(1-\alpha)\,u} \int_0^u du' \int_{(i-1)\,u-u'}^{i.u-u'} e^{-v}\, dv$$

$$= \frac{1}{(1-\alpha)\,u} e^{-(i-2)u} (1 - e^{-u})^2 \qquad (49)$$

3.2.1.3. Cas de l'avant dernier groupe dont la léthargie limite est inférieure ou égale à $\varepsilon + u$

Nous calculons la probabilité pour un neutron de léthargie comprise dans l'intervalle [0,u] avant le choc d'avoir une léthargie après le choc comprise dans l'intervalle [n.u, (n+1) u]

$$P_{n+1} = \frac{1}{(1-\alpha)\,u} \left[\int_0^{(n+1)\,u-\varepsilon} du' \int_{n.u}^{u'+\varepsilon} e^{-(u''-u')}\, du'' \right.$$

$$\left. + \int_{(n+1)\,u-\varepsilon}^{u} du' \int_{n.u}^{(n+1)\,u} e^{-(u''-u')}\, du'' \right] \qquad (50)$$

$$= \frac{1}{(1-\alpha)\,u}\left[\int_0^{(n+1)\,u-\varepsilon} du' \int_{n\,u-u'}^{\varepsilon} e^{-v}\,dv + \int_{(n+1)\,u-\varepsilon}^{u} du' \int_{n\,u-u'}^{(n+1)\,u-u'} e^{-v}\,dv\right]$$

$$= \frac{1}{(1-\alpha)\,u}\left[e^{-(n-1)\,u} - 2\,e^{-n\,u} + \alpha(1+\varepsilon-(n+1)\,u)\right] \qquad (51)$$

3.2.1.4. Cas du dernier groupe dont la léthargie limite est supérieure à ε

Nous calculons la probabilité pour un neutron de léthargie comprise dans l'intervalle [0,u] avant le choc d'avoir une léthargie après choc comprise dans l'intervalle [(n+1) u, ε+u]

$$P_{n+2} = \frac{1}{(1-\alpha)\,u}\int_{(n+1)\,u-\varepsilon}^{u} du' \int_{(n+1)\,u}^{u'+\varepsilon} e^{-(u''-u')}\,du'' \qquad (52)$$

$$= \frac{1}{(1-\alpha)\,u}\int_{(n+1)\,u-\varepsilon}^{u} du' \int_{(n+1)\,u}^{\varepsilon} e^{-v}\,dv$$

$$= \frac{1}{(1-\alpha)\,u}\left[e^{-n\,u} - \alpha(1+\varepsilon - n\,u)\right] \qquad (53)$$

S'agissant d'un calcul de ralentissement le système (44) est résolu directement en descendant l'axe des énergies.

L'initialisation se fait en supposant une densité de ralentissement constante au-dessus du point de départ du calcul.

σ_p étant la section potentielle, la source se calcule de la façon suivante :

3.2.1.5. Groupes dont la léthargie limite est inférieure ou égale à ε

Soit Δu_i la largeur en léthargie du groupe i, (u_{i-1}, u_i)

$$S = \frac{\sigma_p}{1-\alpha}\left[\int_{-\varepsilon+u_{i-1}}^{-\varepsilon+u_i} du' \int_{u_{i-1}}^{u'+\varepsilon} du''\, e^{-(u''-u')}\right.$$

$$\left. + \int_{-\varepsilon+u_i}^{0} du' \int_{u_{i-1}}^{u_i} du''\, e^{-(u''-u')}\right] \qquad (54)$$

$$= \frac{\sigma_p}{1-\alpha}\left[e^{-u_{i-1}} - e^{-u_i} - \alpha\,\Delta u_i\right] \qquad (55)$$

3.2.1.6. Groupes dont la léthargie limite est supérieure à ε

$$S = \frac{\sigma_D}{1-\alpha} \int_{-\varepsilon+u_{i-1}}^{0} du' \int_{u_{i-1}}^{u'+\varepsilon} du'' \; e^{-(u''-u')} \tag{56}$$

$$= \frac{\sigma_D}{1-\alpha} \left[e^{-u_{i-1}} - \alpha(1+\varepsilon - u_{i-1}) \right] \tag{57}$$

Nous déduisons le taux de réaction effectif de la réaction α sur un macrogroupe M par :

$$\sigma_{eff_{\alpha M}} = \frac{1}{\Delta u_M} \sum_{\ell \in M} \sigma_{\alpha \ell} \; \phi_{D\ell} \; \Delta u_\ell \tag{58}$$

3.2.2. *Domaine non résolu*

Nous résolvons l'équation de structure fine de la même façon que dans le domaine résolu mais sur chaque échantillon.

Pour les échantillons dont la largeur totale en léthargie Δu est de l'ordre de quelques ε nous remarquons que [2] :

$$e^{u'-u} = \text{constante pour } u - \varepsilon \leq u' \leq u$$

La conservation de la norme implique :

$$\int_{u-\varepsilon}^{u} P(u' \to u) \, du' = \frac{1}{1-\alpha} \int_{u-\varepsilon}^{u} e^{u'-u} \, du' = 1$$

$R_0 \, \Phi$ peut alors s'écrire :

$$R_0 \, \Phi = \frac{1}{\varepsilon} \int_{u-\varepsilon}^{u} \Sigma_s(u') \, \Phi(u') \, du' \tag{59}$$

et pour un échantillon de largeur Δu, nous avons :

$$R_0 \, \Phi = \frac{1}{\Delta u} \int_{\Delta u} \Sigma_s(u') \, \Phi(u') \, du' \tag{60}$$

Nous utilisons cette approximation pour les échantillons dont la largeur Δu est inférieure ou égale à 2 ε.

L'équation discrétisée s'écrit dans ce cas :

$$\frac{1}{\Delta u} \sum_j \sigma_{sj} \; \phi_{Dj} \; \Delta u_j - (\sigma_{ai} + \sigma_{si} + \sigma_e) \; \phi_{Di} + \sigma_e = 0 \tag{61}$$

Posons :

$$T = \frac{1}{\Delta u} \sum_j \sigma_{sj} \phi_{0j} \Delta u_j \qquad (62)$$

nous avons

$$\phi_{0i} = \frac{\sigma_e + T}{\sigma_{ai} + \sigma_{si} + \sigma_e} \qquad (63)$$

et

$$T = \frac{1}{\Delta u} \sum_j \sigma_{sj} \frac{\sigma_e + T}{\sigma_{aj} + \sigma_{sj} + \sigma_e}$$

ou encore

$$T = \frac{\frac{\sigma_e}{\Delta u} \sum_j \frac{\sigma_{sj} \Delta u_j}{\sigma_{aj} + \sigma_{sj} + \sigma_e}}{1 - \frac{1}{\Delta u} \sum_j \frac{\sigma_{sj} \Delta u_j}{\sigma_{aj} + \sigma_{sj} + \sigma_e}} \qquad (64)$$

Le système est explicite et résolu directement. Nous en déduisons un taux de réaction effectif de la réaction α et un flux moyen sur l'échantillon k :

$$\sigma_{eff_{\alpha k}} = \frac{1}{\Delta u_k} \int_{\Delta u_k} \sigma_\alpha(u)\, \phi_0(u)\, du \qquad (65)$$

$$\bar{\phi}_{0k} = \frac{1}{\Delta u_k} \int_{\Delta u_k} \phi_0(u)\, du \qquad (66)$$

Soit $\bar{\sigma}_{\alpha k}$ la section moyenne de la réaction α sur l'échantillon k. Nous définissons le facteur d'autoprotection $A_{\alpha k}$ par :

$$A_{\alpha k} = \frac{\sigma_{eff_{\alpha k}}}{\bar{\phi}_{0k}\, \bar{\sigma}_{\alpha k}} \qquad (67)$$

Nous interpolons linéairement en léthargie les facteurs $A_{\alpha k}$ pour les calculer dans chaque macrogroupe M du domaine non résolu [2][5].

Nous calculons sur chaque macrogroupe M un flux moyen $\bar{\phi}_{0M}$ de la façon suivante : Définissons sur chaque échantillon

$$R^k = \frac{\sigma_{eff_{ak}}}{1 - \bar{\phi}_{0k}} \qquad (68)$$

et interpolons linéairement en léthargie les R^k pour les calculer sur chaque macrogroupe M. Nous pouvons écrire :

$$R^M = \frac{\sigma_{eff_{aM}}}{1 - \bar{\phi}_{0M}} \qquad (69)$$

Le taux de réaction d'absorption sur le macrogroupe M est

$$\sigma_{eff_{aM}} = A_{\alpha M}\ \bar{\phi}_{0M}\ \bar{\sigma}_{aM} \qquad (70)$$

Nous avons

$$R^M = \bar{\phi}_{0M}\ R^M + A_{aM}\ \bar{\sigma}_{aM}\ \bar{\phi}_{0M} \qquad (71)$$

c'est-à-dire

$$\bar{\phi}_{0M} = \frac{R^M}{R^M + A_{\alpha M}\ \bar{\sigma}_{aM}} \qquad (72)$$

L'interpolation des $A_{\alpha k}$ et des $\bar{\phi}_{0k}$ permet donc d'obtenir le taux de réaction effectif de la réaction α sur le macrogroupe M par

$$\sigma_{eff_{\alpha M}} = A_{\alpha M}\ \bar{\phi}_{0M}\ \bar{\sigma}_{\alpha M} \qquad (73)$$

3.3 *Exploitation de la tabulation*

Les taux de réaction effectifs calculés par le système AUTOSECOL sont écrits avec le format de la bibliothèque APOLLO [1].

Au niveau de l'utilisation le sous programme BIEFF du programme APOLLO détermine les valeurs des taux de réaction effectifs qu'il utilise en interpolant les valeurs des taux de réaction effectifs tabulées au point σ_{ev} qu'il a calculé.

Cette interpolation se fait par un polynôme du troisième degré en $\sqrt{\sigma_e}$, sauf entre les deux dernières valeurs de σ_e tabulées où l'interpolation se fait linéairement en fonction de $\frac{1}{\sigma_e}$ (voir à ce sujet l'annexe 2). Le dernier point σ_e de la tabulation correspond toujours à une valeur infinie de ce paramètre.

Le sous programme BIEFF prend également en compte la dépendance en température des taux de réaction effectifs. L'interpolation est faite en utilisant la loi de variation linéaire des intégrales effectives en fonction de $\sqrt{T}$, T étant la température en degré Kelvin du milieu physique (voir à ce sujet l'annexe 3).

4. TESTS ET APPLICATIONS DU SYSTEME AUTOSECOL

Nous présentons d'abord les tests effectués afin de comparer les résultats du calcul AUTOSECOL aux résultats obtenus avec le programme SECOL 12 qui était utilisé pour la tabulation des taux de réaction effectifs et que nous prenons comme référence.

Nous présentons ensuite les applications du système AUTOSECOL aux tabulations des taux de réaction effectifs des isotopes du Hafnium et du Plutonium utilisés dans les cellules des réacteurs étudiés actuellement.

4.1 *Tests du système AUTOSECOL*

Nous comparons les résultats obtenus avec AUTOSECOL à ceux obtenus avec le programme SECOL dans le calcul des taux de réaction effectifs des isotopes U235, Pu239, Ag 107, Ag 109 et Pu241 de l'évaluation ENDF/B.3.

Les calculs ont été faits sur le maillage en énergie présenté au § 4.1.1.

4.1.1. MAILLAGE EN ENERGIE

UTILISE POUR LE CALCUL DES TAUX DE REACTION EFFECTIFS

Groupe	Energies Limites
	10. MeV
1	8.1873 MeV
2	6.7032 MeV
3	5.4881 MeV
4	4.4933 MeV
5	3.6788 MeV
6	3.0119 MeV
7	2.446 MeV
8	2.019 MeV
9	1.653 MeV
10	1.3534 MeV
11	1.108 MeV
12	907.18 keV
13	608.1 keV
14	407.62 keV
15	273.24 keV
16	183.16 keV
17	122.77 keV
18	82.298 eV

Groupe	Energies Limites
	82.298 keV
19	55.166 keV
20	36.979 keV
21	24.788 keV
22	16.616 keV
23	11.138 keV
24	7.4659 keV
25	5.0045 keV
26	3.3546 keV
27	2.2487 keV
28	1.5073 keV
29	1.0104 keV
30	677.29 eV
31	454. eV
32	304.32 eV
33	204. eV
34	136.74 eV
35	91.661 eV
36	67.904 eV

Groupe	Energies Limites
	67.904 eV
37	55.595 eV
38	45.517 eV
39	37.267 eV
40	30.511 eV
41	24.981 eV
42	20.452 eV
43	16.745 eV
44	13.71 eV
45	11.224 eV
46	9.1898 eV
47	7.524 eV
48	6.1601 eV
49	5.0435 eV
50	4.1293 eV
51	3.3807 eV
52	2.7679 eV

4.1.2.

COMPARAISON SECOL - AUTOSECOL

U235 ENDF/B-3 - T = 20 °C

TAUX DE REACTION POUR LA DIFFUSION

	σ_e = 3.4868 barns			σ_e = ∞		
Groupe	SECOL	AUTOSECOL	Δ % *	SECOL	AUTOSECOL	Δ %
36	1.9504	1.95404	- 0.2	12.357	12.367	- 0.08
37	1.8504	1.84713	0.2	13.62	13.618	0.
38	0.87554	0.87691	-0.2	11.783	11.7838	- 0.007
39	1.1138	1.11443	- 0.06	12.28	12.2805	0.
40	1.257	1.25525	0.1	13.983	13.98	0.02
41	1.3773	1.37736	- 0.004	11.083	11.084	- 0.01
42	1.5247	1.52488	- 0.01	12.59	12.589	0.
43	1.1614	1.16113	0.02	13.301	13.3016	- 0.004
44	0.98909	0.98893	0.02	11.038	11.0379	0.009
45	0.74631	0.74697	- 0.09	13.009	13.0068	0.02
46	1.21	1.20912	- 0.07	11.058	11.0599	- 0.02
47	1.4923	1.49553	- 0.2	11.28	11.2789	0.
48	1.4214	1.41826	0.2	11.112	11.1116	0.
49	1.7126	1.71467	- 0.12	10.438	10.4385	- 0.005
50	2.8753	2.87706	- 0.06	10.881	10.8806	0.
51	2.5398	2.53676	0.1	11.278	11.2776	0.
52	1.1975	1.19801	- 0.04	11.411	11.4109	0.

* $\Delta = \dfrac{(\text{SECOL}) - (\text{AUTOSECOL})}{(\text{SECOL})}$

COMPARAISON SECOL - AUTOSECOL

U235 ENDF/B-3 - T = 20°C

TAUX DE REACTION POUR L'ABSORPTION

	σ_e = 3.4868 barns			σ_e = ∞		
Groupe	SECOL	AUTOSECOL	Δ %	SECOL	AUTOSECOL	Δ %
36	3.3133	3.31401	- 0.02	38.538	38.5395	- 0.004
37	3.1014	3.10348	- 0.07	52.13	52.2006	- 0.1
38	3.1546	3.15407	0.02	70.404	70.3417	0.09
39	3.1215	3.12118	0.01	55.54	55.5341	0.01
40	3.1956	3.19629	- 0.02	111.88	111.902	- 0.02
41	3.0396	3.03955	0.002	39.634	39.6381	- 0.01
42	3.0459	3.04559	0.01	86.731	86.7139	0.02
43	3.0746	3.07605	- 0.04	108.64	108.665	- 0.02
44	3.2036	3.20273	0.03	60.478	60.476	0.004
45	3.2285	3.22809	0.01	145.88	145.822	0.04
46	3.1302	3.13076	- 0.02	41.249	41.3339	- 0.2
47	2.8063	2.8052	0.04	149.2	149.095	0.07
48	3.1841	3.18513	0.03	103.19	103.247	- 0.06
49	2.8138	2.81328	0.02	21.069	21.0132	0.3
50	2.4826	2.48208	0.03	30.425	30.4191	0.02
51	2.8472	2.84811	- 0.03	39.346	39.362	- 0.04
52	3.0968	3.09658	0.007	34.487	34.48	0.02

COMPARAISON SECOL - AUTOSECOL

U235 ENDF/B-3 - T = 20 °C

TAUX DE REACTION POUR LA FISSION

	σ_e = 3.4868 barns			σ_e = ∞		
Groupe	SECOL	AUTOSECOL	Δ %	SECOL	AUTOSECOL	Δ %
36	2.4689	2.46935	- 0.02	28.833	28.8332	0.
37	2.1771	2.17883	- 0.08	36.602	36.6594	- 0.2
38	2.179	2.17859	0.	47.572	47.522	0.1
39	2.2281	2.22797	0.006	35.961	35.95753	0.01
40	2.009	2.00905	0.	68.976	68.9902	- 0.02
41	2.2996	2.30032	- 0.03	31.801	31.8144	- 0.04
42	1.7503	1.74922	0.06	45.236	45.2121	0.05
43	2.1518	2.1531	- 0.06	71.397	71.4236	- 0.04
44	2.0416	2.04126	0.02	39.186	39.1937	- 0.01
45	1.7165	1.71548	0.06	57.49	57.4451	0.08
46	2.3778	2.37834	- 0.02	30.493	30.5536	- 0.2
47	1.8325	1.83126	0.07	109.99	109.91	0.07
48	1.311	1.31208	- 0.08	35.152	35.1923	- 0.1
49	2.1037	2.10279	0.04	15.815	15.7747	0.3
50	0.95303	0.95295	0.008	6.0108	6.0088	0.03
51	1.6422	1.6432	- 0.06	24.579	24.5921	- 0.05
52	2.4571	2.45685	0.01	27.224	27.2181	0.02

COMPARAISON SECOL - AUTOSECOL

U235 ENDF/B-3 - T = 20°C

CALCUL DES TAUX DE REACTION SUR LES ECHANTILLONS

Définition des échantillons :

1 : 54 eV - 82 eV

2 : 6.2865 keV - 6.33365 keV

3 : 12.516 keV - 12.566 keV

4 : 18.7455 keV - 18.7955 keV

5 : 24.95 keV - 25 keV

Flux - σ_e = 3.4868 b.

ECHANTILLON	SECOL	AUTOSECOL
1	0.40733	0.40735
2	0.49033	0.49032
3	0.52111	0.52110
4	0.61092	0.61091
5	0.61434	0.61433

TAUX DE REACTION POUR LA DIFFUSION

	σ_e = 3.4868 b.		σ_e = ∞	
ECHANTILLON	SECOL	AUTOSECOL	SECOL	AUTOSECOL
1	4.7352	4.7354	11.659	11.660
2	5.6790	5.6789	11.593	11.593
3	6.0883	6.0882	11.693	11.693
4	6.8617	6.8615	11.237	11.237
5	6.9484	6.9483	11.319	11.319

TAUX DE REACTION POUR L'ABSORPTION

	σ_e = 3.4868 b.		σ_e = ∞	
ECHANTILLON	SECOL	AUTOSECOL	SECOL	AUTOSECOL
1	2.0862	2.0862	5.2536	5.2536
2	1.7743	1.7742	3.6598	3.6597
3	1.6632	1.6632	3.2096	3.2096
4	1.3432	1.3432	2.2036	2.2036
5	1.3241	1.3241	2.1582	2.1582

TAUX DE REACTION POUR LA FISSION

	σ_e = 3.4868 b.		σ_e = ∞	
ECHANTILLON	SECOL	AUTOSECOL	SECOL	AUTOSECOL
1	1.5513	1.5513	3.9615	3.9617
2	1.3417	1.3417	2.7757	2.7757
3	1.2601	1.2601	2.4378	2.4378
4	1.0308	1.0307	1.6937	1.6937
5	1.0186	1.0188	1.6632	1.6632

4.1.3.

COMPARAISON SECOL - AUTOSECOL

PU 239 ENDF/B-3 - T = 20°C

TAUX DE REACTION POUR LA DIFFUSION

	σ_e = 5. b.			σ_e = ∞		
Groupe	SECOL	AUTOSECOL	Δ %	SECOL	AUTOSECOL	Δ %
33	3.2673	3.2669	0.01	20.947	20.940	0.03
34	3.2216	2.2213	0.01	17.610	17.612	0.
35	2.7650	2.7644	0.02	17.301	17.298	0.02
36	2.4423	2.4426	- 0.01	28.225	28.227	- 0.006
37	1.0815	1.0826	- 0.1	17.874	17.873	0.004
38	2.2085	2.2064	0.09	25.275	25.273	0.008
39	3.1778	3.1775	0.01	23.070	23.070	0.
40	4.8757	4.8751	0.01	9.2883	9.2876	0.008
41	4.7499	4.7510	- 0.02	11.460	11.459	0.
42	2.7547	2.7548	- 0.003	13.277	13.277	0.
43	3.3479	3.3490	- 0.03	14.382	14.382	0.
44	0.81943	0.81977	- 0.04	16.587	16.587	0.
45	1.4914	1.4917	- 0.02	13.953	13.948	0.04
46	1.2905	1.2893	0.09	10.039	10.043	- 0.04
47	1.7832	1.7844	- 0.07	12.345	12.346	- 0.005
48	2.0344	2.0332	0.06	7.6073	7.6061	0.02
49	3.3106	3.3104	0.006	8.8980	8.8977	0.
50	3.4284	3.4284	0.	9.4643	9.4641	0.002
51	3.2959	3.2960	- 0.003	9.8073	9.8072	0.001
52	3.0169	3.0170	- 0.003	10.067	10.066	0.005

COMPARAISON SECOL - AUTOSECOL

PU 239 ENDF/B-3 - T = 20°C

TAUX DE REACTION POUR L'ABSORPTION

	σ_e = 5. b.			σ_e = ∞		
Groupe	SECOL	AUTOSECOL	Δ %	SECOL	AUTOSECOL	Δ %
33	3.8052	3.8033	0.05	32.437	32.384	0.2
34	3.5284	3.5280	0.01	31.489	31.518	- 0.09
35	3.9013	3.9022	- 0.02	40.679	4.694	- 0.04
36	4.0710	4.0707	0.	88.866	88.860	0.006
37	4.6459	4.6452	0.01	122.92	122.84	0.07
38	3.8919	3.8932	- 0.04	87.875	87.747	- 0.08
39	3.0992	3.0997	- 0.02	90.375	90.367	0.08
40	2.2657	2.2698	- 0.004	8.9752	8.9753	- 0.001
41	2.8666	2.8662	0.02	38.830	38.827	0.
42	3.7162	3.7160	0.005	85.839	85.832	0.008
43	3.6494	3.6488	0.02	94.369	94.354	0.02
44	4.6795	4.6795	0.	224.18	224.14	0.01
45	4.3500	4.3496	0.	147.15	147.03	0.08
46	4.0492	4.0500	- 0.02	215.45	215.55	- 0.04
47	4.2078	4.2072	0.01	207.45	207.40	0.02
48	3.5898	3.5904	- 0.02	18.374	18.399	- 0.1
49	3.1234	3.1234	0.	8.3980	8.3981	0.
50	3.1891	3.1891	0.	8.8055	8.8051	0.004
51	3.3292	3.3291	0.003	9.9173	9.9166	0.007
52	3.5143	3.5143	0.	11.747	11.747	0.

COMPARAISON SECOL - AUTOSECOL

PU 239 ENDF/B-3 - T = 20°C

TAUX DE REACTION POUR LA FISSION

	σ_e = 5. b.			σ_e = ∞		
Groupe	SECOL	AUTOSECOL	Δ %	SECOL	AUTOSECOL	Δ %
33	2.4374	2.4359	0.06	15.813	15.767	0.3
34	2.1800	2.1801	0.	17.071	17.099	- 0.2
35	2.8468	2.8474	- 0.02	23.153	23.164	- 0.05
36	3.2830	3.2826	0.	56.554	56.549	0.008
37	3.8210	3.8217	- 0.02	90.287	90.261	0.03
38	2.2780	2.2784	0.	29.763	29.791	- 0.09
39	1.1210	1.1210	0.	13.774	13.774	0.
40	1.4076	1.4077	- 0.005	4.6717	4.6716	- 0.002
41	1.6667	1.6665	0.01	19.593	19.592	0.007
42	2.4081	2.4079	0.009	50.521	50.516	0.007
43	2.3307	2.3301	0.03	46.550	46.541	0.02
44	3.4978	3.4978	0.	126.02	126.96	- 0.7
45	2.6672	2.6668	0.01	89.56	89.471	0.1
46	2.8094	2.8102	- 0.03	162.60	162.68	- 0.05
47	2.1616	2.1615	0.006	105.63	105.60	0.02
48	2.3545	2.3544	0.004	11.251	11.262	- 0.1
49	2.5777	2.5776	0.003	6.9288	6.9286	0.004
50	2.8596	2.8595	0.003	7.8978	7.8973	0.007
51	3.0894	3.0893	0.003	9.2040	9.2033	0.007
52	3.2735	3.2735	0.	10.941	10.941	0.

4.1.4.

COMPARAISON SECOL - AUTOSECOL

Ag 107 ENDF/B-3 - T = 20°C

TAUX DE REACTION POUR LA DIFFUSION

	σ_g = 20. b.			σ_g = ∞		
Groupe	SECOL	AUTOSECOL	Δ %	SECOL	AUTOSECOL	Δ %
30	6.7442	6.7442	0.	7.4706	7.4707	- 0.001
31	6.8129	6.8122	0.01	12.160	12.159	0.
32	6.3866	6.3862	0.007	11.093	11.092	0.008
33	5.7096	5.7096	0.	6.0367	6.0368	- 0.002
34	5.7298	5.7294	0.008	10.103	10.103	0.
35	5.8744	5.8743	0.002	6.0647	6.0646	0.002
36	6.2784	6.2784	0.	6.5061	6.5061	0.
37	7.0431	7.0432	- 0.01	7.5067	7.5069	- 0.003
38	5.0470	5.0467	0.	28.288	28.284	0.02
39	3.1681	3.1681	0.	7.2851	7.2846	0.007
40	4.8391	4.8391	0.	5.1852	5.1851	0.
41	5.2969	5.2970	- 0.001	5.6502	5.6503	- 0.001
42	5.5697	5.5697	0.	6.0447	6.0447	0.
43	5.5678	5.5676	0.004	8.2637	8.2648	- 0.01
44	2.5104	2.5104	0.	19.503	19.500	0.02
45	4.3177	4.3178	- 0.002	4.9957	4.9957	0.
46	4.6976	4.6976	0.	5.2608	5.2608	0.
47	4.8123	4.8123	0.	5.3785	5.3785	0.
48	4.8487	4.8487	0.	5.4460	5.4460	0.
49	4.8489	4.8489	0.	5.4897	5.4897	0.
50	4.8276	4.8276	0.	5.5201	5.5201	0.
51	4.7916	4.7916	0.	5.5422	5.5422	0.
52	4.7442	4.7442	0.	5.5587	5.5587	0.

COMPARAISON SECOL - AUTOSECOL

Ag 107 ENDF/B-3 - T = 20°C

TAUX DE REACTION POUR L'ABSORPTION

	σ_e = 20. b.			σ_e = ∞		
Groupe	SECOL	AUTOSECOL	Δ %	SECOL	AUTOSECOL	Δ %
30	0.87244	0.87246	- 0.002	1.6606	1.6606	0.
31	2.1556	2.1555	0.003	7.2846	7.2839	0.009
32	1.464	1.464	0.	7.3439	7.3435	0.005
33	0.9009	0.9010	- 0.007	1.4904	1.4905	- 0.005
34	2.4551	2.4550	0.003	12.659	12.658	0.009
35	0.5930	0.5930	0.	0.61515	0.61514	0.002
36	0.67226	0.67227	0.	0.69730	0.69731	0.
37	1.0861	1.0862	- 0.01	1.1642	1.1643	- 0.009
38	7.8359	7.8361	- 0.002	122.26	122.24	0.02
39	7.8237	7.8232	0.007	81.105	81.102	0.005
40	1.2646	1.2645	0.006	1.3575	1.3574	0.006
41	1.2216	1.2216	0.	1.3031	1.3031	0.
42	1.5407	1.5408	- 0.005	1.6739	1.6739	0.
43	5.5247	5.5262	- 0.03	11.340	11.348	- 0.07
44	10.782	10.780	0.02	198.66	198.63	0.02
45	2.6464	2.6463	0.004	3.0751	3.0749	0.
46	2.1227	2.1227	0.	2.3773	2.3773	0.
47	2.0989	2.0989	0.	2.3459	2.3459	0.
48	2.1919	2.1919	0.	2.4619	2.4619	0
49	2.3357	2.3357	0.	2.6446	2.6446	0.
50	2.5116	2.5116	0.	2.8720	2.8721	0.
51	2.7124	2.7124	0.	3.1375	3.1376	0.
52	2.9353	2.9354	- 0.002	3.4396	3.4397	- 0.002

COMPARAISON SECOL - AUTOSECOL

Ag 109 ENDF/B-3 - T = 20°C

TAUX DE REACTION POUR LA DIFFUSION

	σ_e = 20. b.			σ_e = ∞		
Groupe	SECOL	AUTOSECOL	Δ %	SECOL	AUTOSECOL	Δ %
30	5.9138	5.9124	0.02	8.6097	8.6081	0.02
31	6.0606	6.0601	0.009	13.512	13.511	0.009
32	5.5497	5.5495	0.004	14.556	14.555	0.009
33	4.4050	4.4047	0.	5.5694	5.5690	0.007
34	5.5567	5.5557	0.02	10.692	10.690	0.02
35	4.3086	4.3093	- 0.02	17.554	17.553	0.005
36	4.8570	4.8574	0.	16.183	16.182	0.008
37	4.2638	4.2630	0.02	10.160	10.115	0.4
38	3.6101	3.6102	- 0.002	7.9037	7.9482	- 0.6
39	3.6468	3.6470	- 0.005	6.3223	6.3223	0.
40	4.4463	4.4470	- 0.02	8.0098	7.9837	0.3
41	2.5155	2.5148	0.03	6.9329	6.9582	- 0.4
42	4.1953	4.1952	0.003	4.3649	4.3647	0.005
43	4.8986	4.8985	0.002	4.8961	4.8959	0.004
44	5.1279	5.1278	0.002	5.4586	5.4584	0.004
45	5.5811	5.5810	0.002	6.2509	6.2506	0.005
46	6.0141	6.0140	0.	7.5991	7.5986	0.007
47	6.1038	6.1038	0.	10.503	10.501	0.02
48	5.0520	5.0526	- 0.01	20.714	20.707	0.04
49	2.7174	2.7182	- 0.03	526.96	526.03	0.2
50	0.87510	0.87547	- 0.04	66.227	66.363	- 0.2
51	0.17098	0.17107	- 0.05	1.1265	1.1273	- 0.08
52	0.08677	0.08677	0.	0.29209	0.29209	0.

COMPARAISON SECOL - AUTOSECOL

Ag 109 ENDF/B-3 - T = 20°C

TAUX DE REACTION POUR L'ABSORPTION

	σ_e = 20. b.			σ_e = ∞		
Groupe	SECOL	AUTOSECOL	Δ %	SECOL	AUTOSECOL	Δ %
30	0.98815	0.98809	0.006	2.8566	2.8563	0.01
31	2.0054	2.0053	0.003	8.7819	8.7812	0.008
32	1.9303	1.9302	0.006	10.773	10.7722	0.007
33	1.5666	1.5666	0.	6.2720	6.2718	0.
34	1.5696	1.5691	0.03	9.7936	9.7922	0.01
35	1.6114	1.6116	- 0.01	20.844	20.842	0.01
36	4.5153	4.5151	0.006	54.451	54.444	0.01
37	2.7966	2.7914	0.2	22.922	22.716	0.9
38	2.7485	2.7546	- 0.2	21.725	21.928	- 0.9
39	5.1460	5.1458	0.	46.053	46.051	0.005
40	4.3015	4.2953	0.1	31.873	31.809	0.2
41	5.142	5.148	- 0.1	84.780	85.179	- 0.5
42	0.71631	0.71636	- 0.007	0.74563	0.74570	- 0.009
43	0.76426	0.76418	0.01	0.79654	0.79646	0.01
44	1.1656	1.1655	0.01	1.2422	1.2420	0.01
45	2.0829	2.0825	0.02	2.3408	2.3403	0.02
46	4.0810	4.0802	0.02	5.2060	2.2046	0.03
47	8.2068	8.2051	0.02	14.535	14.529	0.04
48	14.734	14.732	0.01	66.528	66.484	0.07
49	19.590	19.589	0.	5365.3	5355.0	0.2
50	19.178	19.178	0.	1034.9	1036.5	- 0.02
51	16.471	16.471	0.	98.517	98.545	- 0.03
52	14.098	14.098	0.	48.448	48.451	0.007

4.1.5. COMPARAISON SECOL - AUTOSECOL

PU 241 ENDF/B-2 - T = 20°C - (DOMAINE RESOLU)

TAUX DE REACTION POUR LA DIFFUSION

	σ_e = 40 b.			σ_e = ∞		
Groupe	SECOL	AUTOSECOL	Δ %	SECOL	AUTOSECOL	Δ %
39	6.7550	6.7551	0.002	11.117	11.117	0.
40	5.7983	5.7982	0.002	11.179	11.178	0.008
41	4.4656	4.4651	0.02	12.276	12.276	0.
42	5.8474	5.8470	0.007	11.208	11.209	0.008
43	6.9938	6.9401	0.8	15.572	15.540	0.2
44	2.9007	2.9137	0.5	18.487	18.546	0.3
45	4.6711	4.6516	0.4	14.313	14.346	0.2
46	3.1980	3.2227	0.8	11.226	11.223	0.03
47	2.3310	2.3311	0.004	11.855	11.861	0.05
48	1.3616	1.3650	0.3	12.005	12.005	0.
49	1.7129	1.7223	0.6	11.614	11.614	0.
50	1.9349	1.9205	0.7	13.409	13.429	0.1
51	4.0738	4.0621	0.3	12.204	12.206	0.02
52	5.6991	5.6980	0.02	11.018	11.018	0.

COMPARAISON SECOL - AUTOSECOL

PU 241 ENDF/B-2 - T = 20°C

TAUX DE REACTION POUR LA DIFFUSION ET FLUX MOYEN SUR

LES ECHANTILLONS DU DOMAINE NON RESOLU

	σ_s (σ_e = 40 b.)			$\bar{\Phi}_0$ (σ_e = 40 b.)			$\bar{\sigma}_s$		
ECHANTILLON	SECOL	AUTOSECOL	Δ %	SECOL	AUTOSECOL	Δ %	SECOL	AUTOSECOL	Δ %
17.5 kev	7.6306	7.6361	0.07	0.65333	0.65426	0.1	12.467	12.446	0.2
35. kev	11.015	10.940	0.7	0.94260	0.93552	0.7	11.690	11.698	0.07
52.4 kev	9.6909	9.6887	0.02	0.80578	0.80539	0.05	12.334	12.337	0.02

4.1.6. Conclusion des tests

Ces tests montrent un très bon accord avec la référence du code SECOL. Les calculs représentant largement les différents isotopes susceptibles d'être autoprotégés.

4.2 Tabulation et utilisation des taux de réaction effectifs du Hafnium

Le Hafnium naturel est utilisé dans les réacteurs à plaques sous forme de croix de contrôle et de poison consommable. Les différents isotopes qui le composent présentent des sections efficaces fortement résonnantes.

Le calcul de l'effet de la présence du Hafnium sur le flux dans les cellules d'un réacteur demande un traitement de l'autoprotection des résonances.

Nous nous intéressons ici à la présence du Hafnium dans les croix de contrôle dans lesquelles sa concentration est forte et l'effet d'autoprotection très important.

4.2.1. Tabulation des taux de réaction effectifs

Nous utilisons dans nos calculs les évaluations des sections efficaces neutroniques des isotopes Hf 176, Hf 177, Hf 179 et Hf 180 faites au DPRMA (CEN/Saclay) [14].

Ces évaluations nous donnent les paramètres des résonances résolues et des sections correctives ; il n'y a pas de domaine non résolu.

Nous donnons dans le tableau suivant quelques caractéristiques physiques de ces isotopes :

Isotope Hf	Domaine Résolu	Nombre de Résonances	Intégrales de capture (barn)
176	10^{-5} eV - 1.2 keV	22	640. ± 30.
177	"	147	7180. ± 500.
178	"	17	1950. ± 120.
179	"	75	630. ± 60.
180	"	7	43. ± 8.

Nous avons tabulé les taux de réaction effectifs à 20°C et à 500°C par le système AUTOSECOL pour ces isotopes en fonction de différentes valeurs du paramètre σ_e.

4.2.2. *Utilisation de la tabulation des taux de réaction effectifs du Hafnium dans le schéma de calcul des réacteurs à plaques*

Nous présentons ici quelques résultats de calcul des taux de réaction pour l'absorption par les isotopes du Hafnium dans une cellule d'un réacteur à plaque [15].

Les calculs sont faits avec le programme APOLLO utilisant les taux de réaction effectifs des isotopes du Hafnium tabulés par AUTOSECOL.

Les résultats sont comparés à ceux obtenus avec le programme de Monte Carlo TRIPOLI [16] qui utilise directement les mêmes sections efficaces de bases qui ont conduit à la tabulation des taux de réaction effectifs des isotopes du Hafnium.

4.2.2.1. Géométrie du calcul

Les calculs sont faits en géométrie plane. La structure d'une cellule élémentaire est la suivante :

Réflexion	UO_2	H_2O	Hf	H_2O	UO_2	Réflexion
Abcisses droites (m)	0.	0.2	0.9	1.4	2.1	2.3

4.2.2.2. Composition en isotopes (at/10^{-24} cm^3)

UO_2 : $N_{U5} = 7.04758. 10^{-4}$

$N_{U8} = 2.17580. 10^{-2}$

$N_O = 4.49251. 10^{-2}$

H_2O : $N_H = 6.6552. 10^{-2}$

$N_O = 3.3276. 10^{-2}$

Hf : $N_{Hf176} = 2.3032. 10^{-3}$

$N_{Hf177} = 8.2404. 10^{-3}$

$N_{Hf178} = 1.2090. 10^{-2}$

$N_{Hf179} = 5.7779. 10^{-3}$

$N_{Hf180} = 1.5822. 10^{-3}$

4.2.2.3. Calcul avec une lame en Hf naturel

Nous présentons les résultats concernant les taux de réactions pour l'absorption intégrés sur le volume de la zone contenant le Hf naturel et sur les groupes en énergies définis de la façon suivante :

1 : 6 keV - 5 eV avec normalisation à un neutron franchissant 6 keV.

2 : 5 eV - 0. eV avec normalisation à un neutron franchissant 6 keV.

3 : 5 eV - 0. eV avec normalisation à un neutron franchissant 5 eV.

L'écart relatif $\frac{\text{APOLLO - TRIPOLI}}{\text{TRIPOLI}}$ n'est indiqué que lorsqu'il est supérieur à l'écart quadratique sur les résultats TRIPOLI.

Les résultats du tableau 1 montrent une forte surestimation de la capture épithermique par le calcul APOLLO sauf pour l'isotope Hf 178.

Les résultats sur la capture thermique avec renormalisation à 5 eV sont en bon accord entre les deux calculs, sauf pour l'isotope Hf 177.

Dans le calcul APOLLO l'effet d'autoprotection n'est pris en compte qu'au dessus de 2.7679 eV. Les deux premières résonances de l'isotope Hf 177 sont situées à 1.01 eV et 2.384 eV et représente seules plus de 50 % de la contribution à l'intégrale de résonance pour la capture par l'isotope Hf 177.

L'écart constaté dans le groupe thermique sur la capture par l'isotope Hf 177 s'explique donc par un défaut d'autoprotection des deux premières résonances de cet isotope.

4.2.2.4. Calcul avec une lame en Hf naturel à faible concentration

L'effet d'autoprotection est lié à la concentration de l'isotope résonnant dans la zone considérée. Afin d'étudier l'importance de l'effet d'autoprotection sur les écart constatés dans le groupe épithermique des calculs sont faits en diminuant artificiellement d'un facteur 100 la concentration du Hf naturel dans la zone considérée.

Nous présentons dans le tableau 2 les résultats de la même façon que précédemment. Les résultats de ce tableau montrent à nouveau un bon accord entre les deux calculs pour l'absorption thermique. L'écart constaté sur l'isotope Hf 177 est diminué ce qui va bien dans le sens d'une diminution de l'effet d'autoprotection quand la concentration diminue.

En ce qui concerne la capture épithermique les résultats ne présentent aucune amélioration par rapport au calcul précédent.

Les écarts constatés ne semblent pas être liés à l'effet d'autoprotection.

4.2.2.5. Calcul avec une lame ne contenant qu'un seul isotope du Hf

Afin d'étudier l'effet dû à la présence simultanée de plusieurs isotopes résonnants des calculs sont faits en supposant qu'un seul isotope du Hf est présent dans la zone considérée.

TABLEAU 1

LAME EN Hf NATUREL

TAUX DE REACTION INTEGRES POUR L'ABSORPTION (%)

		TRIPOLI	APOLLO	$\frac{A - T}{T}$
Hf_{176}	1	1.5701	2.268	+ 44.4
Hf_{176}	2	0.3309	0.2963	- 11
Hf_{176}	3	0.6560	0.6520	
Hf_{177}	1	19.6481	23.4791	+ 19.5
Hf_{177}	2	29.6627	29.3643	
Hf_{177}	3	59.3024	64.6179	+ 9
Hf_{178}	1	6.7543	6.6302	- 1.8
Hf_{178}	2	5.5254	4.9709	- 10
Hf_{178}	3	11.0483	10.9387	
Hf_{179}	1	10.1125	10.8372	8
Hf_{179}	2	1.3452	1.2163	- 9.6
Hf_{179}	3	2.6893	2.6765	
Hf_{180}	1	1.8315	2.2076	20.5
Hf_{180}	2	1.3892	1.2650	- 9
Hf_{180}	3	2.7773	2.7837	
Hf_{nat}	1	39.9165	45.2221	+ 13.3
Hf_{nat}	2	38.2534	37.1128	- 3
Hf_{nat}	3	76.4771	81.6689	+ 6.8

TABLEAU 2

LAME EN H_f NATUREL A FAIBLE CONCENTRATION

TAUX DE REACTION INTEGRES POUR L'ABSORPTION

(%)

	TRIPOLI	APOLLO	
Hf_{176} 1	0.14	0.2003	+ 43
Hf_{176} 2	0.0779	0.0760	- 2.4
Hf_{176} 3	0.0943	0.0933	
Hf_{177} 1	1.3849	1.5931	+ 15
Hf_{177} 2	9.7814	9.9684	+ 2
Hf_{177} 3	11.1463	11.5615	+ 3.8
Hf_{178} 1	1.4383	1.7177	+ 19
Hf_{178} 2	1.2038	1.1940	
Hf_{178} 3	1.458	1.466	
Hf_{179} 1	0.5556	0.5547	
Hf_{179} 2	0.3073	0.3052	
Hf_{179} 3	0.3722	0.3747	
Hf_{180} 1	0.1011	0.1302	+ 28
Hf_{180} 2	0.3523	0.3472	- 1
Hf_{180} 3	0.4267	0.4263	
Hf_{nat} 1	3.6201	4.256	+ 17.6
Hf_{nat} 2	11.7027	11.8908	+ 1.6
Hf_{nat} 3	14.1739	14.5994	+ 3

Les calculs sont faits pour les isotopes Hf 177 et Hf 178 sur la même géométrie avec leur concentration respective dans le Hf naturel.

Les taux de réaction pour l'absorption sont intégrés sur le volume de la zone et sur les groupes en énergies difinis de la façon suivante :

1 : 14 MeV - 821 keV
2 : 821 MeV - 5.53 keV
3 : 5.53 keV - 0.625 eV
4 : 0.625 eV - 0. eV

Les résultats sont normalisés à un neutron de fission à 14 MeV.

LAME EN H_f 177, PUIS EN H_f 178

TAUX DE REACTION INTEGRES POUR L'ABSORPTION (%)

	TRIPOLI	APOLLO	$\frac{A - T}{T}$
Hf_{177} 1	0.0657	0.0650	-
Hf_{177} 2	1.9103	1.9235	-
Hf_{177} 3	47.4028	49.102	+ 3.6
Hf_{177} 4	27.5704	27.963	+ 1.4
Hf_{178} 1	0.1319	0.1295	-
Hf_{178} 2	0.6535	0.6599	-
Hf_{178} 3	21.3807	21.785	-
Hf_{178} 4	38.8929	38.621	-

Ces résultats présentent un bon accord. Nous constatons toujours l'écart dû au défaut d'autoprotection des deux premières résonances du Hf 177.

La disparition des écarts constatés dans le cas d'une lame en Hf naturel nous conduit à deux remarques :

- le traitement de l'autoprotection des résonances des isotopes du Hf pris séparément est correct dans les calculs APOLLO utilisant les taux de réaction effectifs tabulés par AUTOSECOL.
- les écarts constatés lors du traitement d'une lame en Hf naturel semblent provenir de la présence simultanée de plusieurs isotopes résonnants.

4.2.2.6. Interaction entre les isotopes composant le Hf naturel

Les résultats obtenus dans le calcul de l'absorption résonnante par le Hf naturel semblent montrer que nous sommes en présence d'un phénomène d'interaction entre les résonances des différents isotopes qui le composent.

Les premières résonances des isotopes Hf se trouvent aux énergies suivantes :

Hf 176 : 7,8 eV - Hf 177 : 1,01 eV - 2,384 eV - 5,902 eV
Hf 178 : 7,774 eV - Hf 179 : 5,678 eV - Hf 180 : 72,47 eV

En-dessous de 5 eV nous trouvons seulement les deux premières résonances du Hf 177. Il n'y a donc pas de problème d'interférence. Seul subsiste le traitement de l'autoprotection de ces deux résonances.

Au-dessus de 5 eV les cinq isotopes du Hf présentent des résonances à des énergies très proches les unes des autres.

La tabulation des taux de réaction effectifs est faite séparément pour chaque isotope. Pour chaque isotope résonnant le sous-programme BIEFF du programme APOLLO calcule une section équivalente vraie σ_{eV} qui lui permet d'interpoler dans la table des taux de réaction effectifs les valeurs qui lui sont nécessaires. Cette section équivalente est calculée sous la forme (§ 1.3) :

$$\sigma_{eV} = \frac{1}{N_0} (\Sigma_1 + a\, \Sigma_{e\, G\infty})$$

dans laquelle la section totale Σ_1 des isotopes mélangés à l'isotope résonnant est supposée non résonnante et la section équivalente géométrique $\Sigma_{e\, G\infty}$ est calculée en supposant l'isotope résonnant traitée seul dans la zone considérée.

De même lors de la résolution itérative des équations (16) et (17) le sous-programme BIEFF calcule une section équivalente en considérant pour les isotopes mélangés à l'isotope résonnant leurs sections moyennes si ces isotopes n'ont pas encore été autoprotégés, et leur sections autoprotégées dans le cas contraire. Nous voyons donc apparaître une dépendance des calculs en fonction de l'ordre de traitement des isotopes résonnants en présence. Une itération externe sur l'ensemble des isotopes résonnants en présence permet de prendre en compte un effet global des isotopes résonnants les uns sur les autres sans interaction de structure fine [3]. La prise en compte de cet effet global peut s'avérer suffisante dans certains cas (exemple : interaction U 235 - U 238 [3]). Dans l'interaction entre les isotopes de l'Hafnium naturel cet effet global ne représente environ que 10 % de l'effet d'interaction. Il faudrait donc tenir compte de l'interaction de structure fine.

Pour cela il faut tabuler des taux de réaction effectifs en considérant le Hafnium naturel comme un seul corps-mélange ; c'est-à-dire calculer les sections efficaces de base du mélange en fonction des concentrations de chaque isotope Hf et de leurs sections efficaces, puis calculer les taux de réaction effectifs. (Voir Annexe 7)

Cette tabulation n'est valable que pour un état du mélange représenté par le Hf naturel. Cela suppose donc que les compositions relatives des différents isotopes Hf n'évoluent pas dans le temps les unes par rapport aux autres. Cette hypothèse est possible dans le cas des croix de contrôle du fait de leur forte concentration en Hf naturel. Cela revient à dire que la croix ne s'use pas.

Cette hypothèse ne pourrait pas s'étendre à priori à l'utilisation du Hf comme poison consommable, mais dans ce cas l'effet d'autoprotection est très faible, ce qui permet de négliger l'effet d'interaction.

4.3 *Tabulation et tests des taux de réaction effectifs des isotopes Pu 239, Pu 240 et Pu 241 de l'évaluation ENDF/B-4*

Nous avons tabulé avec le système AUTOSECOL les taux de réaction effectifs des isotopes 239, 240 et 241 du Plutonium à partir des données de la nouvelle évaluation ENDF/B-4.

Les calculs sont faits aux températures 20 °C, 500 °C, 1000 °C et 2000 °C afin de couvrir au mieux toute la gamme des utilisations possibles de ces isotopes dans les calculs de réacteur.

Nous présentons quelques résultats de la tabulation, puis des tests d'utilisation dans des calculs de cellule par le programme APOLLO.

4.3.1. *Tabulation des taux de réaction effectifs*

Nous donnons dans l'annexe 6 quelques tables de taux de réaction effectifs des isotopes du plutonium obtenus avec le système AUTOSECOL.

Nous présentons ici quelques caractéristiques physiques de l'évaluation de ces isotopes et les observations faites sur le couplage entre l'effet Doppler et l'effet d'autoprotection au niveau du calcul des taux de réaction effectifs.

4.3.1.1. *Caractéristiques physiques de l'évaluation ENDF/B-4*

Pu	Domaine résolu	Nombre de résonances	Domaine non résolu
239	1 eV - 301 eV	128	301 eV - 25 keV
240	0.5 eV - 3.91 keV	201	3.91 keV - 40 keV
241	1.8 eV - 49.5 eV	44	49.5 eV - 52.4 keV

4.3.1.2. Effet Doppler - Effet d'autoprotection

Nous présentons les valeurs des taux de réactions effectifs d'absorption pour chaque isotope pour différentes valeurs de la température et du paramètre σ_e.

Nous avons calculé la variation relative des taux de réaction effectifs en fonction de la température pour chaque valeur de σ_e. En d'autres termes ceci représente l'importance de l'effet Doppler en fonction de l'autoprotection.

4.3.1.2-1 Résultats

Pu 239 - Energies Limites du calcul : 16.745 eV - 13.71 eV							
	σ_{eff} absorption				$\frac{\sigma_{effa}^{T} - \sigma_{effa}^{20}}{\sigma_{effa}^{20}} \times 100$		
σ_e (barns) \ T (°C)	20	500	1000	2000	500	1000	2000
5	4.6920	4.7029	4.7121	4.7275	0.23	0.43	0.76
40	27.296	27.658	27.933	28.356	1.33	2.33	3.89
100	50.312	51.516	52.351	53.558	2.39	4.05	6.45
250	82.351	85.342	87.214	89.717	3.63	5.91	8.94
500	110.73	115.42	118.15	121.55	4.24	6.70	9.77
1000	139.76	145.55	148.69	152.33	4.15	6.39	8.99
2000	164.90	171.48	174.41	177.37	3.37	5.07	6.92
4000	186.23	190.52	192.57	194.67	2.31	3.41	4.53
10000	203.05	205.39	206.44	207.45	1.15	1.67	2.17
∞	217.46	217.43	217.40	217.32	0.	0.	0.

Pu 240 - Energies Limites du calcul : 1.1×10^{-4} eV - 2.7679 eV							
σ_{eff} absorption					$\frac{\sigma_{effa}^{T} - \sigma_{effa}^{20}}{\sigma_{effa}^{20}} \times 100$		
σ_e(barns) \ T (°C)	20	500	10000	5000	500	1000	2000
40	30.347	30.372	30.398	30.451	0.08	0.17	0.34
100	64.483	64.593	64.709	64.945	0.17	0.35	0.72
250	128.85	129.31	129.79	130.78	0.36	0.74	1.50
500	207.37	208.87	210.03	212.74	0.83	1.28	2.59
1000	321.18	324.66	326.24	335.25	1.08	2.2.	4.36
2000	483.01	491.74	500.49	517.18	1.81	3.62	7.07
4000	712.02	732.33	751.80	787.49	2.85	5.59	10.06
10000	1162.8	1215.3	1261.0	1341.8	4.52	8.52	15.4
10^5	4797.9	4822.3	4825.9	4830.5	0.5	0.6	0.7

Pu 240 - Energies Limites du calcul : 45.517 eV - 37.267 eV							
$\sigma_{eff\ absorption}$					$\frac{\sigma_{effa}^{T} - \sigma_{effa}^{20}}{\sigma_{effa}^{20}}$		
σ_e(barns) \ T (°C)	20	500	1000	5000	500	1000	2000
40	13.300	14.359	15.362	17.102	8.	15.	29.
100	22.224	25.341	28.040	32.395	14.	26.	46.
250	37.082	44.651	50.598	59.493	20.	36.	60.
500	54.729	67.544	76.884	89.936	23.	40.	64.
1000	79.894	98.676	111.19	127.48	23.	39.	60.
2000	112.84	136.04	149.99	166.70	20.	33.	48.
4000	150.48	174.00	186.67	200.84	16.	24.	33.
10000	196.75	214.33	222.64	231.02	9.	13.	17.
∞	258.78	258.80	258.80	258.79	-	-	-

Pu 241 - Energies Limites du calcul : 6.1601 eV - 5.0435 eV							
	σ_{eff} absorption				$\frac{\sigma_{effa}^{T} - \sigma_{effa}^{20}}{\sigma_{effa}^{20}} \times 100$		
σ_e (barns) \ T (°C)	20	500	1000	2000	500	1000	2000
40	35.452	35.507	35.555	35.630	0.16	0.29	0.5
100	76.039	76.276	76.474	76.782	0.31	0.57	1.
250	142.17	142.87	143.44	144.28	0.49	0.9	1.5
500	202.67	203.81	204.69	205.96	0.56	1.	1.6
1000	259.92	261.26	262.25	263.61	0.51	0.9	1.4
2000	304.55	305.70	306.53	307.61	0.38	0.65	1.
4000	334.14	334.93	335.47	336.13	0.24	0.4	0.6
10000	355.35	355.71	355.94	356.17	0.1	0.16	0.2
∞	371.35	371.28	371.20	371.04	0.	0.	0.

Ces résultats montrent que l'importance de l'effet Doppler passe par un maximum lorsque le paramètre σ_e varie de zéro à l'infini.

4.3.1.2-2 Interprétation dans l'hypothèse "résonance étroite"

Considérons le mélange homogène d'un isotope résonnant (indice c) et d'un isotope non résonnant (indice m).

Nous définissons les quantités suivantes :

$\sigma_p^{(c)}$: partie potentielle de la section efficace de diffusion de l'isotope résonnant

$\sigma_s^{(m)}$: section efficace de diffusion de l'isotope non résonnant

N_c et N_m : concentrations respectives de l'isotope résonnant et de l'isotope non résonnant.

Posons :

$$\sigma_e = \sigma_p^{(c)} + \frac{N_m}{N_c}\sigma_s^{(m)}$$

σ_o^i : valeur de la section totale de l'isotope résonnant au pic de la résonance i

Γ_γ^i : largeur de capture radiative de la résonance i

$\psi(v,s)$: fonction définie par l'expression (31) du § 2.1.5

avec

$$s = \frac{2(E - E^i)}{\Gamma} \quad \text{et} \quad v = \frac{\Gamma}{\Delta}$$

E : énergie d'un point de calcul

E^i : énergie de la résonance i

Γ : largeur totale à l'énergie E de la résonance i

Δ : largeur Doppler (proportionnelle à $\sqrt{T}$; T étant la température en °K)

Posons :

$$\beta = \frac{\sigma_e}{\sigma_o^i}$$

$$J(v,\beta) = \int_o^\infty \frac{\psi(v,s)}{\beta + \psi(v,s)}\,ds$$

On montre que dans cette situation physique et dans l'hypothèse "résonance étroite", la contribution d'une résonance i à l'intégrale effective s'écrit [17] :

$$I_i = \frac{\sigma_e \Gamma_\gamma^i}{E^i} J(v,\beta)$$

Calculons la dérivée de I_i par rapport à la température :

$$\frac{\partial I_i}{\partial T} = \frac{\sigma_e \Gamma_\gamma^i}{E^i} \frac{\partial J(v,\beta)}{\partial T} = \frac{\sigma_e \Gamma_\gamma^i}{E^i} \int_0^\infty ds \frac{\partial}{\partial T} \left[\frac{\psi(v,s)}{\beta + \psi(v,s)} \right]$$

comme $\frac{\partial \beta}{\partial \sigma} = 0$, nous avons :

$$\frac{\partial I_i}{\partial T} = \frac{\sigma_e \Gamma_\gamma^i}{E^i} \int_0^\infty ds \frac{(\beta + \psi(v,s)) \frac{\partial \psi(v,s)}{\partial T} - \psi(v,s) \frac{\partial \psi(v,s)}{\partial T}}{(\beta + \psi(v,s))^2}$$

$$= \frac{\sigma_e \Gamma_\gamma^i}{E^i} \beta \int_0^\infty ds \frac{\frac{\partial \psi(v,s)}{\partial \sigma}}{(\beta + \psi(v,s))^2}$$

$$= \frac{\sigma_o^i \Gamma_\gamma^i}{E^i} \beta^2 \int_0^\infty ds \frac{\frac{\partial \psi(v,s)}{\partial \sigma}}{(\beta + \psi(v,s))^2}$$

Considérons le cas où la concentration de l'isotope résonnant devient infinie. Nous avons :

$$N_c \to \infty \quad ; \quad \sigma_e \to \sigma_p^{(c)} \ll \sigma_o^i$$

donc $\beta \ll 1$ ou encore $\beta \simeq 0$

alors $\frac{\partial I_i}{\partial T} \to 0$

Considérons maintenant le cas où la concentration de l'isotope résonnant devient nulle (cas de la dilution infinie). Nous avons :

$$N_c \to 0 \quad ; \quad \sigma_e \to \infty \quad ; \quad \beta \to \infty$$

Nous pouvons écrire :

$$\frac{\partial I_i}{\partial T} = \frac{\sigma_o^i \Gamma_\gamma^i}{E^i} \beta^2 \int_o^\infty ds \frac{\frac{\partial \psi(v,s)}{\partial T}}{\beta^2 (1 + \frac{\psi(v,s)}{\beta})^2}$$

$$= \frac{\sigma_o^i \Gamma_\gamma^i}{E^i} \int_o^\infty ds \frac{\frac{\partial \psi(v,s)}{\partial T}}{(1 + \frac{\psi(v,s)}{\beta})^2}$$

$$= \frac{\sigma_o^i \Gamma_\gamma^i}{E^i} \int_o^\infty ds \frac{\partial \psi(v,s)}{\partial T}$$

$$= \frac{\sigma_o^i \Gamma_\gamma^i}{E^i} \frac{\partial}{\partial T} \int_o^\infty ds \, \psi(v,s)$$

Nous avons

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi(v,x) \, dx = \Pi \quad \text{et} \quad \psi(v,-x) = \psi(v,x)$$

$$\frac{\partial I_i}{\partial T} = \frac{\sigma_o^i \Gamma_\gamma^i}{E^i} \frac{\partial}{\partial T} \frac{\Pi}{2} = 0$$

Dans le cas de la dilution infinie nous pouvons encore écrire :

$$J(v,\beta) = \int_o^\infty \frac{\psi(v,s)}{\beta + \psi(v,s)} ds = \int_o^\infty \frac{\psi(v,s)}{\beta} ds = \frac{1}{\beta} \frac{\Pi}{2}$$

Ceci nous donne :

$$I_i = \frac{\sigma_e \Gamma_\gamma^i}{E^i} \frac{1}{\beta} \frac{\Pi}{2} = \frac{\sigma_e \Gamma_\gamma^i}{E^i} \frac{\sigma_o^i}{\sigma_e} \frac{\Pi}{2}$$

$$= \frac{\Pi}{2} \frac{\sigma_o^i \Gamma_\gamma^i}{E_i} = I_{\text{résonance}}$$

Nous constatons donc que dans le cas de la dilution infinie et dans le cas de la concentration infinie de l'isotope résonnant, l'intégrale effective ne varie plus en fonction de la température.

Bien qu'obtenu dans l'approximation "résonance étroite" ce résultat confirme ce que nous observons sur les résultats de nos calculs.

4.3.2. *Tests d'utilisation des taux de réaction effectifs des isotopes du plutonium dans un calcul de cellule* :

Nous présentons ici le résultat de tests de calcul de flux et de taux de réaction dans une cellule de réacteur à l'aide du programme APOLLO.

4.3.2.1. Cellule UO_2 - Pu O_2 à 20°C

4.3.2.1.1. Situation physique

La situation physique de nos calculs est la suivante :

- cellule à deux milieux en géométrie cylindrique
- rayons extérieurs de chaque milieu en cm : 0.445, 0.761656
- composition du milieu combustible :

Les concentrations sont exprimées en 10^{-24} atomes/cm^3

U 235 - N_{U5} : 4.4428×10^{-4}

U 238 - N_{U8} : 2.1983×10^{-2}

Pu 239 - N_{Pu39} : 3.5582×10^{-4}

Pu 240 - N_{Pu40} : 8.2534×10^{-5}

Pu 241 - N_{Pu41} : 1.0219×10^{-5}

Pu 242 - N_{Pu42} : 1.9×10^{-6}

O_2 - N_O : 4.5755×10^{-2}

- Composition du milieu modérateur :

H_2O - N_{H_2O} : 3.338×10^{-2}

4.3.2.1.2. Sections multigroupes et taux de réaction effectifs utilisés

Nous avons effectué les calculs sur les trois cas définis ci-dessous :

	Isotopes "multigroupe"			Isotopes effectifs		
	CAS 1	CAS 2	CAS 3	CAS 1	CAS 2	CAS 3
Pu 239	B 4	UK.RI	UK.RI	B4/AUTO	J.P.	B4/AUTO
Pu 240	B 4	UK.RI	UK.RI	B4/AUTO	x	B4/AUTO
Pu 241	UK 71	UK 71	UK 71	B4/AUTO	B2/M.G.	B4/AUTO

avec les définitions suivantes :

B2 : évaluation ENDF/B-2
B4 : évaluation ENDF/B-4
UK 71 : évaluation UKNDL 71
UK.RI : évaluation groupe RIBON (saclay)
J.P. : tabulation effectuée par F. JEANPIERRE
M.G. : tabulation effectuée par M. GRANDOTTO (1972)
AUTO : tabulation réalisée par AUTOSECOL

Le cas n°1 représente les nouvelles données de l'évaluation ENDF/B-4 et les taux de réaction effectifs résultats de calculs AUTOSECOL.

Le cas n° 2 représente les sections multigroupes et les taux de réaction effectifs utilisés jusqu'à présent par le programme APOLLO.

Le cas n° 3 a pour but de mettre en évidence les différences entre les deux bibliothèques utilisées au niveau du domaine des résonances.

4.3.2.1.3. Résultats

Nous donnons les résultats concernant le k effectif et le flux moyen sur la zone combustible défini par :

$$\overline{\Phi} = \frac{\int_\Omega \int_D \Phi \, \vec{dr} \, du}{\int_\Omega \int_D \vec{dr} \, du}$$

Ω étant le volume de la zone et D un domaine en énergie.

Nous donnons ensuite les résultats concernant les sections moyennes et les taux de réaction de diffusion, absorption et fission pour les isotopes du Pu. Ces quantités sont définies de la façon suivante :

$$\overline{\sigma} = \frac{\int_\Omega \int_D \sigma \, \Phi \, \vec{dr} \, du}{\int_\Omega \int_D \Phi \, \vec{dr} \, du}$$

Taux de réaction :

$$T = \int_Z \int_D \Sigma \, \Phi \, \vec{dr} \, du$$

Les domaines énergétiques où nous présentons les résultats correspondent respectivement à l'ensemble du domaine de calcul (A), au domaine rapide (B), au domaine thermique (C)et au domaine des résonances (D).

k_∞		
CAS 1	CAS 2	CAS 3
1.361 981	1.358 691	1.358 211

Flux moyen - Zone combustible			
	CAS 1	CAS 2	CAS 3
A 10 MeV - 10^{-4} eV	0.50565	0.50276	0.50265
B 10 MeV - 2.7679 eV	0.73753	0.73121	0.73116
C 2.7679 eV - 10^{-4} eV	0.16011	0.16234	0.16213
D 36.979keV-2.7679eV	0.39245	0.39514	0.39492

Pu 239

	Sections moyennes			Taux de réaction		
	CAS 1	CAS 2	CAS 3	CAS 1	CAS 2	CAS 3
Diffusion						
A	8.6465	9.0958	8.9406	2.4421×10^{-2}	2.5543×10^{-2}	2.5102×10^{-2}
B	8.6003	9.072	8.8937	2.1202×10^{-2}	2.1173×10^{-2}	2.1736×10^{-2}
C	8.9642	9.2558	9.2558	3.2194×10^{-3}	3.3705×10^{-3}	3.3661×10^{-3}
D	12.518	13.072	12.55	1.0331×10^{-2}	1.0862×10^{-2}	1.0423×10^{-2}
Absorption						
A	107.21	108.12	108.49	0.30279	0.30362	0.3046
B	11.853	11.439	11.99	2.922×10^{-2}	2.7957×10^{-2}	2.9302×10^{-2}
C	761.74	757.01	757.01	0.27357	0.27566	0.2753
D	31.806	30.161	31.798	2.625×10^{-2}	2.5063×10^{-2}	2.6406×10^{-2}
Fission						
A	71.238	72.192	72.266	0.2012	0.20273	0.20289
B	7.2148	7.15562	7.3223	1.7786×10^{-2}	1.749×10^{-2}	1.7895×10^{-2}
C	510.71	508.7	508.7	0.18341	0.18524	0.185
D	18.133	17.755	18.252	1.4965×10^{-2}	1.4754x10	1.5156×10^{-2}

A : ·10 MeV - 10^{-4} eV

B : 2.7679 eV - 10 MeV

C : 2.7679 eV - 10^{-4} eV

D : 36.979 keV - 2.7679 eV

Pu 240

	Sections moyennes			Taux de réaction		
	CAS 1	CAS 2	CAS 3	CAS 1	CAS 2	CAS 3
Diffusion						
A	16.278	16.412	15.779	1.0664×10^{-2}	1.069×10^{-2}	1.0276×10^{-2}
B	12.114	13.249	12.527	6.9268×10^{-3}	7.511×10^{-3}	7.101×10^{-3}
C	44.867	37.64	37.64	3.7375×10^{-3}	3.1793×10^{-3}	3.1751×10^{-3}
D	21.836	23.963	21.845	4.1801×10^{-3}	4.6186×10^{-3}	4.2081×10^{-3}
Absorption						
A	86.478	85.322	84.95	5.6654×10^{-2}	5.5577×10^{-2}	5.5322×10^{-2}
B	5.109	5.4602	5.152	2.9214×10^{-3}	3.1068×10^{-3}	2.9206×10^{-3}
C	645.02	821.21	821.2	5.3732×10^{-2}	5.2471×10^{-2}	5.2402×10^{-2}
D	13.016	13.966	13.007	2.4917×10^{-3}	2.6919×10^{-3}	2.5056×10^{-3}

Pu 241

	Sections moyennes			Taux de réaction		
	CAS 1	CAS 2	CAS 3	CAS 1	CAS 2	CAS 3
Diffusion						
A	9.0414	9.0667	9.0831	7.3339×10^{-4}	7.3124×10^{-4}	7.323×10^{-4}
B	8.5593	8.577	8.5965	6.06×10^{-4}	6.0205×10^{-4}	6.0337×10^{-4}
C	12.35	12.353	12.353	1.2738×10^{-4}	1.2919×10^{-4}	1.2902×10^{-4}
D	12.291	12.291	12.291	2.9132×10^{-4}	2.9189×10^{-4}	2.9315×10^{-4}
Absorption						
A	113.87	115.68	115.8	9.2364×10^{-3}	9.3298×10^{-3}	9.3371×10^{-3}
B	19.001	19.001	19.255	1.3468×10^{-3}	1.3337×10^{-3}	1.3515×10^{-3}
C	785.07	784.57	784.57	7.8912×10^{-3}	7.996×10^{-3}	7.9656×10^{-3}
D	53.099	52.307	53.079	1.2586×10^{-3}	1.2483×10^{-3}	1.266×10^{-3}
Fission						
A	83.69	85.18	85.083	6.7885×10^{-3}	6.8698×10^{-3}	6.8605×10^{-3}
B	15.427	15.653	15.628	1.0922×10^{-3}	1.0987×10^{-3}	1.0969×10^{-3}
C	552.27	551.83	551.83	5.6963×10^{-3}	5.7711×10^{-3}	5.7636×10^{-3}
D	42.62	42.656	42.603	1.0102×10^{-3}	1.018×10^{-3}	1.0161×10^{-3}

L'ensemble de ces résultats ne montrent pas de différence sensible en utilisant les nouvelles valeurs des sections multigroupes et des taux de réaction effectifs des isotopes du plutonium.

4.3.2.2. Cellule Pu O_2 à 20°C

4.3.2.2.1. Situation physique

Nous présentons ici un ensemble de résultats, pour une situation physique différent du cas qui précède par la composition du milieu combustible dans lequel tout le combustible est constitué par du plutonium

La composition est la suivante :

Pu 239	- N_{Pu9}	=	1.8071×10^{-2}
Pu 240	- N_{Pu40}	=	4.1916×10^{-3}
Pu 241	- N_{Pu41}	=	5.1898×10^{-4}
Pu 242	- N_{Pu42}	=	9.6449×10^{-5}
O_2	- N_O	=	4.5756×10^{-2}

Le but de ces calculs est d'augmenter l'importance des isotopes du plutonium dans le calcul afin de chercher à mettre en évidence les différences entres les bibliothèques utilisées.

4.3.2.2.2. Résultats

Les résultats sont présentés sous la même forme que précédemment sur les trois cas définis au paragraphe 4.3.2.1.2.

k_∞		
CAS 1	CAS 2	CAS 3
1.844 532	1.755 526	1.814 225

Flux moyen - Zone combustible			
	CAS 1	CAS 2	CAS 3
10 MeV - 10^{-4} eV	0.2762	0.28022	0.27588
10 MeV-2.7679 eV	0.45759	0.4641	0.4568
2.7679eV - 10^{-4} eV	5.9097×10^{-3}	6.1948×10^{-3}	6.2669×10^{-3}
36.979keV-2.7679eV	0.16426	0.17127	0.17008

Pu 239

	Sections moyennes			Taux de réaction		
	CAS 1	CAS 2	CAS 3	CAS 1	CAS 2	CAS 3
Diffusion						
A	7.564	8.0022	7.9088	0.59266	0.63611	0.61894
B	7.5447	7.9854	7.8907	0.58607	0.62914	0.61189
C	9.7819	9.8766	9.8767	6.5854×10^{-3}	6.97×10^{-3}	7.0511×10^{-3}
D	11.244	11.733	11.3	0.19725	0.21462	0.20526
Absorption						
A	5.3156	5.3468	5.4212	0.41649	0.42502	0.42426
B	3.9472	3.9861	4.0232	0.30662	0.31404	0.31198
C	163.2	157.26	157.27	0.10987	0.11098	0.11228
D	11.25	11.216	11.216	0.19735	0.20516	0.2051
Fission						
A	3.8335	3.8362	3.8994	0.30037	0.30494	0.30517
B	2.9045	2.904	2.9419	0.22562	0.22879	0.22813
C	111.03	107.91	107.91	7.4747×10^{-2}	7.6151×10^{-2}	7.704×10^{-2}
D	6.9036	6.8486	6.964	0.1211	0.12528	0.1263

A : 10 MeV - 10^{-4} eV

B : 10 MeV - 2.7679 eV

C : 2.7679 eV - 10^{-4} eV

D : 36.979 keV - 2.7679 eV

Pu 240

	Sections moyennes			Taux de réaction		
	CAS 1	CAS 2	CAS 3	CAS 1	CAS 2	CAS 3
Diffusion						
A	9.0249	10.615	9.4951	0.16402	0.19571	0.17236
B	8.7904	10.408	9.2725	0.15838	0.1902	0.16678
C	36.084	33.667	33.669	5.6346×10^{-3}	5.5109×10^{-3}	5.5754×10^{-3}
D	15.009	19.955	15.015	8.1072×10^{-2}	8.4666×10^{-2}	8.3253×10^{-2}
Absorption						
A	4.1551	5.1891	4.2788	7.5315×10^{-2}	9.5677×10^{-2}	7.7667×10^{-2}
B	1.9136	2.8893	1.9061	3.4478×10^{-2}	5.2801×10^{-2}	3.4284×10^{-2}
C	262.79	261.94	261.98	4.1036×10^{-2}	4.2876×10^{-2}	4.3393×10^{-2}
D	4.3594	8.6132	4.3463	1.7739×10^{-2}	3.6545×10^{-2}	1.8313×10^{-2}

Pu 241

	Sections moyennes			Taux de réaction		
	CAS 1	CAS 2	CAS 3	CAS 1	CAS 2	CAS 3
Diffusion						
A	7.8558	7.887	7.9257	1.7677×10^{-2}	1.8005×10^{-2}	1.7813×10^{-2}
B	7.8228	78531	7.8912	1.7452×10^{-2}	1.7799×10^{-2}	1.7574×10^{-2}
C	11.659	11.673	11.673	2.2541×10^{-4}	2.3657×10^{-4}	2.3932×10^{-4}
D	12.155	12.032	12.156	6.1237×10^{-3}	6.3206×10^{-3}	6.3414×10^{-3}
Absorption						
A	10.454	10.37	10.771	2.3524×10^{-2}	2.3673×10^{-2}	2.4209×10^{-2}
B	9.2657	9.161	9.5328	2.0671×10^{-2}	2.0728×10^{-2}	2.123×10^{-2}
C	147.6	145.31	145.31	2.8537×10^{-3}	2.945×10^{-3}	2.9793×10^{-3}
D	34.823	33.44	34.754	1.7544×10^{-2}	1.7589×10^{-2}	1.8131×10^{-2}
Fission						
A	8.5679	8.5972	8.8144	1.9279×10^{-2}	1.9626×10^{-2}	1.9811×10^{-2}
B	7.7055	7.7214	7.9162	1.719×10^{-2}	1.747×10^{-2}	1.763×10^{-2}
C	108.08	106.37	106.36	2.0896×10^{-3}	2.1559×10^{-3}	2.181×10^{-3}
D	28.205	27.54	28.145	1.421×10^{-2}	1.4467×10^{-2}	1.4683×10^{-2}

Ces résultats montrent essentiellement l'effet de la prise en compte de l'autoprotection des résonances du Pu 240 dans le domaine épithermique. La bibliothèque utilisée pour le cas n° 2 ne contient pas de tabulation des taux de réaction effectifs du Pu 240.

Nous constatons dans ces calculs que la valeur de la section moyenne d'absorption sur le domaine des résonances dans le cas n° 3 est environ la moitié de celle obtenue dans le cas n° 2.

4.3.2.3. Etude de l'effet d'autoprotection et de l'effet Doppler sur la résonance à 1,056 eV du Pu 240

Le programme APOLLO utilisé dans les calculs précédents ne permet pas de traiter l'autoprotection des résonances en dessous de sa coupure thermique située à 2,7679 eV.

Dans le but d'étudier cet effet sur la résonance à 1,056 eV du Pu 240 nous avons utilisé le programme EXCALIBUR qui permet l'utilisation du formalisme de calcul de l'autoprotection jusqu'à une énergie quelconque [18].

Nous avons ainsi calculé les sections autoprotégées du Pu 240 sur le maillage du programme APOLLO jusqu'à 0,54 eV dans la configuration de la cellule UO_2-PuO_2 décrite au § 4.3.2.1.1.*

Les taux de réaction effectifs tabulés par le système AUTOSECOL étant paramétrés en fonction de la température nous avons calculé les sections autoprotégées du Pu 240 pour plusieurs valeurs de la température.

En introduisant ces sections autoprotégées dans les calculs effectués avec le programme APOLLO sur la cellule étudiée nous avons obtenu un ensemble de résultats permettant d'observer l'importance des phénomènes d'autoprotection et de Doppler dus à la résonance à 1,056 eV du Pu 240.

Nous présentons les résultats concernant le k_∞ et le flux moyen dans la zone combustible la section moyenne d'absorption et le taux de réaction pour l'absorption du Pu 240 dans une zone d'énergie limitée par 2,7679 eV et $1{,}1\ 10^{-4}$ eV. Ces valeurs sont données pour les calculs sans autoprotection de la résonance à 1,056 eV du Pu 240 à 20 °C, puis avec autoprotection pour différentes températures.

---

* Nous donnons dans l'annexe 8 quelques valeurs des sections autoprotégées d'absorption du Pu 240 ainsi calculées.

	k_∞	$\bar{\varphi}$	$\bar{\sigma}_a$	Taux de réaction absorption
sans auto. 20 °C	1,35518	0,16011	643,70	$5,3622 \times 10^{-2}$
auto. 20 °C	1,35930	0,16040	619,43	$5,1696 \times 10^{-2}$
- 200 °C	1,35749	0,16032	629,87	$5,2537 \times 10^{-2}$
- 400 °C	1,35587	0,16024	639,25	$5,3294 \times 10^{-2}$
- 800 °C	1,35526	0,16017	643,05	$5,3590 \times 10^{-2}$
- 1000 °C	1,35157	0,16003	664,24	$5,5310 \times 10^{-2}$
- 1400 °C	1,34897	0,15991	679,47	$5,6581 \times 10^{-2}$
- 1800 °C	1,34670	0,15980	692,86	$5,7606 \times 10^{-2}$
Ecart à 20 °C				
auto. - sans auto.	+ 412 pcm	+ 0,18 %	- 3,8 %	- 3,6 %
Ecart 200 °C/20 °C	- 181 pcm	- 0,05 %	+ 1,7 %	+ 1,6 %
Ecart 400 °C/20 °C	- 343 pcm	- 0,1 %	+ 3,2 %	+ 3,1 %
Ecart 800 °C/20 °C	- 404 pcm	- 0,14 %	- 3,8 %	+ 3,7 %
Ecart 1000 °C/20 °C	- 773 pcm	- 0,23 %	+ 7,2 %	+ 7 %
Ecart 1400 °C/20 °C	- 1033 pcm	- 0,3 %	+ 9,7 %	+ 9,3 %
Ecart 1800 °C/20 °C	- 1260 pcm	- 0,37 %	+ 11,8 %	+ 11,4 %

Ces résultats montrent que le traitement correct de l'autoprotection et de l'effet Doppler de la résonance à 1,056 eV du Pu 240 doit être pris en considération.

CONCLUSION

Le système AUTOSECOL fournit une bibliothèque de taux de réaction effectifs afin de prendre en compte l'effet d'autoprotection des résonances sur le flux neutronique dans les cellules des réacteurs nucléaires.

La souplesse d'utilisation du système AUTOSECOL, en regard des méthodes utilisées auparavant pour résoudre le même problème permet d'envisager des possibilités nouvelles.

Le système AUTOSECOL permet de tester rapidement l'influence de la prise en compte de l'effet d'autoprotection des résonances d'isotopes nouveaux.

Il permet de suivre l'évolution des évaluations des données nucléaires et d'étudier rapidement l'intérêt apporté par de nouvelles données.

Le système AUTOSECOL s'inscrit dans le cadre du traitement des données nucléaires et vient s'ajouter aux programmes TRAME, TRIANGLE et MICRAL.

Ces programmes conduisent à la création de bibliothèques de sections efficaces multigroupes pour les codes de calcul neutronique.

Afin de disposer d'un ensemble cohérent et complet de programme de création de bibliothèque il conviendra de développer une étude sur le calcul des matrices de thermalisation.

ANNEXE 1

SECTION EQUIVALENTE ET FACTEUR DE BELL

La section équivalente est définie par :

$$\sigma_e\ [\sigma_0] = \frac{\sigma_0\ [1-P_{00}]}{P_{00}}$$

Dans le cas homogène nous avons :

$$P_{00} = \frac{\Sigma_0}{\Sigma_0 + \Sigma_1} \quad ; \quad \sigma_e = \frac{\Sigma_1}{N_0}$$

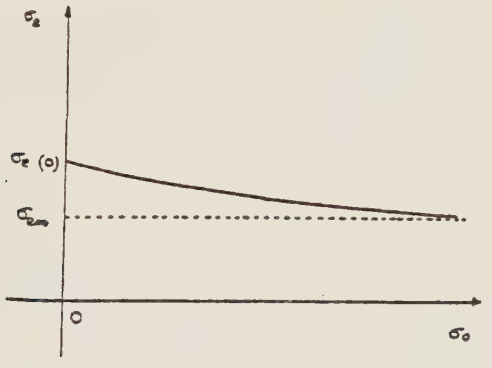
avec Σ_0 : section totale de l'isotope résonnant

N_0 : son nombre de noyaux

Σ_1 : section totale des autres isotopes non résonnants mélangés à l'isotope résonnant.

σ_e est constante en milieu homogène.

Dans le cas hétérogène σ_e dépend de la géométrie. Elle a l'allure suivante :



Dans le cas d'un isotope résonnant (indice 0, concentration N_0), mélangé à d'autres isotopes non résonnant de section totale Σ_1 dans un milieu 1 et d'isotopes non résonnants de section totale Σ_2 dans un milieu 2, nous avons [3] :

$$\sigma_e\ (\sigma_0, \Sigma_1, \Sigma_2) = \frac{1}{N_0}\ (\Sigma_1 + \Sigma_{e_G}\ (\Sigma_0 + \Sigma_1, \Sigma_2))$$

Σ_{e_G} est la section équivalente du milieu 2 pour l'ensemble du milieu 1.

Cela conduit à poser :

$$\sigma_{e_v} = \frac{1}{N_0} \left(\Sigma_1 + a \, \Sigma_{e_{G\infty}} (\Sigma_2) \right)$$

a est le facteur de Bell.

Si I est l'intégrale de résonance dans la géométrie réelle et I_H l'intégrale de résonance dans la géométrie homogène, fonction de σ_e, l'équation

$$I_H (\sigma_{e_v}) = I$$

détermine σ_{e_v} si Σ_1 et Σ_2 sont constantes sur l'intervalle en léthargie d'intégration.

Le facteur de Bell a et σ_{e_v} sont calculés par le sous programme JEZABEL du programme APOLLO [3], dans l'approximation NR [résonance étroite].

En approximation NR l'équation de structure fine donne

$$\phi_0^{NR} = \frac{\sigma_p + \sigma_e (\sigma_0)}{\sigma_0 + \sigma_e (\sigma_0)}$$

L'intégrale effective d'absorption à conserver est

$$I_{a_{eff}}^{NR} = \int_{\Delta u} \frac{\sigma_e (u)}{\sigma_0 (u)} \quad \frac{\sigma_p + \sigma_e (\sigma_0}{1 + \frac{\sigma_e (\sigma_0)}{\sigma_0}} \, du$$

Posons

$$P (\sigma_0) \, d\sigma_0 = \int_D \frac{\sigma_e (u)}{\sigma_0 (u)} \, du$$

$$D = \left\{ u \in D \iff \sigma_0 - \frac{d\sigma_0}{2} < \sigma_0 (u) < \sigma_0 + \frac{d\sigma_0}{2} \right\}$$

Nous avons

$$I_{eff}^{NR} = \int_0^\infty P (\sigma_0) \, \frac{\sigma_p + \sigma_e (\sigma_0)}{1 + \frac{\sigma_e (\sigma_0)}{\sigma_0}} \, d\sigma_0$$

Le calcul de $P(\sigma_0)$ peut être fait une fois pour toutes pour un isotope donné . C'est un calcul qu'il convient de situer au niveau de la phase tabulation. Le résultat de cette tabulation étant alors utilisé par le sous programme JEZABEL. La variation de a et de σ_{e_v} avec la température est supposée négligeable dans ces calculs.

Le calcul en milieu homogène fonction du paramètre σ_e donne

$$I_H^{NR}(\sigma_e) = \int_{\Delta u} \sigma_a(u) \frac{\sigma_p + \sigma_e}{\sigma_0(u) + \sigma_e} du$$

La conservation des intégrales effectives donne σ_{e_v} et le facteur de Bell est défini par

$$a = \frac{\sigma_{e_v} - \sigma_m}{\sigma_{e_\infty} - \sigma_m}$$

$\sigma_m = \frac{\Sigma_m}{N_0}$; Σ_m étant la section macroscopique du modérateur mélangé au combustible.

σ_{e_∞} est la section équivalente assymptotique.

ANNEXE 2

VARIATION DE L'INTEGRALE EFFECTIVE EN FONCTION DE $\frac{1}{\Sigma_e}$

Dans l'approximation NR nous avons $\phi_0 = \frac{\Sigma_e + \Sigma_p}{\Sigma_0 + \Sigma_e}$ et l'intégrale effective s'écrit :

$$I_{eff} = \int \sigma_a \phi_0 \, du = \int \sigma_a \frac{\Sigma_e + \Sigma_p}{\Sigma_0 + \Sigma_e} \, du = \int \sigma_a \frac{1 + \frac{\Sigma_p}{\Sigma_e}}{1 + \frac{\Sigma_0}{\Sigma_e}} \, du$$

Si Σ_e est assez grand, ou encore $x = \frac{1}{\Sigma_e}$ assez petit pour développer $\frac{1}{1+x}$, nous pouvons écrire

$$I_{eff} \simeq \int \sigma_a \, (1 + x \, \Sigma_p) \, (1 - x \, \Sigma_0) \, du$$

En négligeant les termes du second ordre en x nous avons :

$$I_{eff} \simeq \int \sigma_a \left(1 + x \, (\Sigma_p - \Sigma_0)\right) du = \int \sigma_a \, du + x \int \sigma_a \, (\Sigma_p - \Sigma_0) \, du$$

$$= I_{res} + x \, (\Sigma_p \, I_{res} - \int \sigma_a \, \Sigma_0 \, du)$$

Posons :

$$I = \int \sigma_a \, \Sigma_0 \, du$$

Nous écrivons alors :

$$I_{eff} \simeq I_{res} + x \, (\Sigma_p \, I_{res} - I) = A + B \, x$$

C'est-à-dire que pour les grandes valeurs de Σ_e nous pouvons considérer que I_{eff} varie linéairement en fonction de $\frac{1}{\Sigma_e}$.

ANNEXE 3

VARIATION EN TEMPERATURE DE L'INTEGRALE EFFECTIVE

Le coefficient de température est définit par :

$$\beta = \frac{I(T) - I(T_0)}{I(T_0) - \delta} \quad \frac{1}{\sqrt{T} - \sqrt{T_0}}$$

$I(T)$ et $I(T_0)$ sont les intégrales effectives aux températures T et T_0 exprimées en degré Kelvin.

δ est l'intégrale sur la léthargie de la section $1/V$.

La variation linéaire des intégrales effectives en $\sqrt{T}$ est considérée comme valable entre 20°C et 500°C, puis entre 500°C et 1000°C pour l'U238 et l'U235. [3] [5]. Pour le Pu239 les tabulations précédentes utilisaient les valeurs 20°C et 1000°C [5].

Dans les calculs AUTOSECOL nous avons effectués des calculs pour les températures 20°C, 500°C, 1000°C et 2000°C - (Isotopes du plutonium par exemple).

Le choix des paramètres température est une donnée du programme AUTOCAR ce qui nous laisse toute liberté de calcul selon l'isotope étudié.

ANNEXE 4

DONNEES ENDF [8]

Les données de la bande ENDF utilisées dans ce travail sont, pour un isotope, les suivantes :

1 - Données générales :

- La masse atomique du noyau rapportée à celle du neutron
- Le spin du noyau
- Le rayon de diffusion du noyau
- Le nombre de domaines énergétiques et leurs limites

2 - Domaine résolu :

(formalisme BWSL et BWML)

- Le nombre de valeurs de ℓ et les valeurs de ℓ
- Le nombre de valeurs de J et les valeurs de J pour chaque valeur de ℓ
- Le nombre de résonances pour chaque valeur de ℓ

Par valeur de ℓ et de J pour chaque résonance :

- l'énergie, les largeurs totale , neutronique, de capture radiative, de fission.

3 - Domaine non résolu

- Le nombre de valeurs de ℓ et les valeurs de ℓ
- Le nombre de valeurs de J et les valeurs de J pour chaque valeur de ℓ
- Le nombre de points d'énergie, et leurs valeurs, où sont donnés les paramètres moyens.
- Le schéma d'interpolation en énergie des paramètres moyens.

Par valeur de ℓ et de J, pour chaque point d'énergie :

- l'espacement moyen, les largeurs moyennes neutronique, de capture radiative, de fission.
- Le nombre de degré de liberté pour chaque voie.

4 - Sections correctives

Pour chaque réaction, par point d'énergie, sont données des sections efficaces et le schéma d'interpolation.

Ces sections s'ajoutent au calcul des sections BREIT WIGNER dans le domaine résolu et au calcul des sections moyennes dans le domaine non résolu.

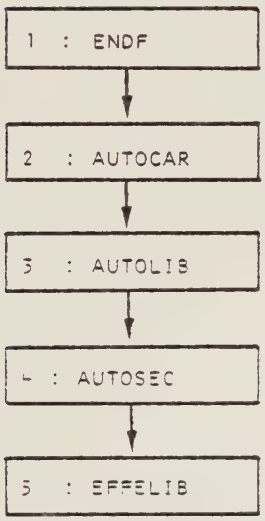
5 - Nombre de neutrons par fission

Les valeurs des nombres moyens de neutrons par fission sont donnés pour les corps fissiles.

ANNEXE 5

LE SYSTEME AUTOSECOL

ORGANISATION GENERALE DU SYSTEME AUTOSECOL



ENDF : Bandes de données nucléaires

AUTOCAR : Programme de calcul de sections efficaces sur les domaines résolu et non résolu d'un isotope ENDF pour un nombre quelconque de valeurs de la température du calcul de l'effet Doppler.

AUTOCAR utilise un système de gestion dynamique de la mémoire.

Un calcul AUTOCAR pour un isotope et quatre à cinq températures demande en moyenne un encombrement mémoire de 300 K octets et un temps de calcul variant de 40 secondes à 4 minutes selon les cas (ordinateur IBM 360/91).

AUTOLIB : Bandes-résultats du calcul AUTOCAR contenant les sections efficaces sur un maillage multigroupe fin et servant de données au programme AUTOSEC.

AUTOSEC : Programme de calcul des taux de réaction effectifs d'un isotope à une température donnée sur un maillage multigroupe large quelconque et pour un nombre quelconque de valeurs du paramètre section équivalente σ_e.

AUTOSEC utilise un système de gestion dynamique de la mémoire.

Un calcul AUTOSEC pour un isotope à une température donnée et pour un nombre quelconque de sections équivalentes demande en moyenne un encombrement mémoire de 150 à 200 K octets et un temps de calcul de l'ordre de 5 à 20 secondes selon les cas.

EFFELIB : Bandes-résultats du calcul AUTOSECOL contenant la tabulation des taux de réaction effectifs d'un isotope pour plusieurs températures et plusieurs sections équivalentes.

La tabulation complète des taux de réaction effectifs d'un isotope pour N_T températures et N_σ sections équivalentes demande donc un passage du programme AUTOCAR et N_T passages du programme AUTOSEC quel que soit N_σ

Ceci compte tenu des performances du système AUTOSECOL est à comparer aux calculs nécessaires auparavant à la tabulation des taux de réaction effectifs d'un isotope.

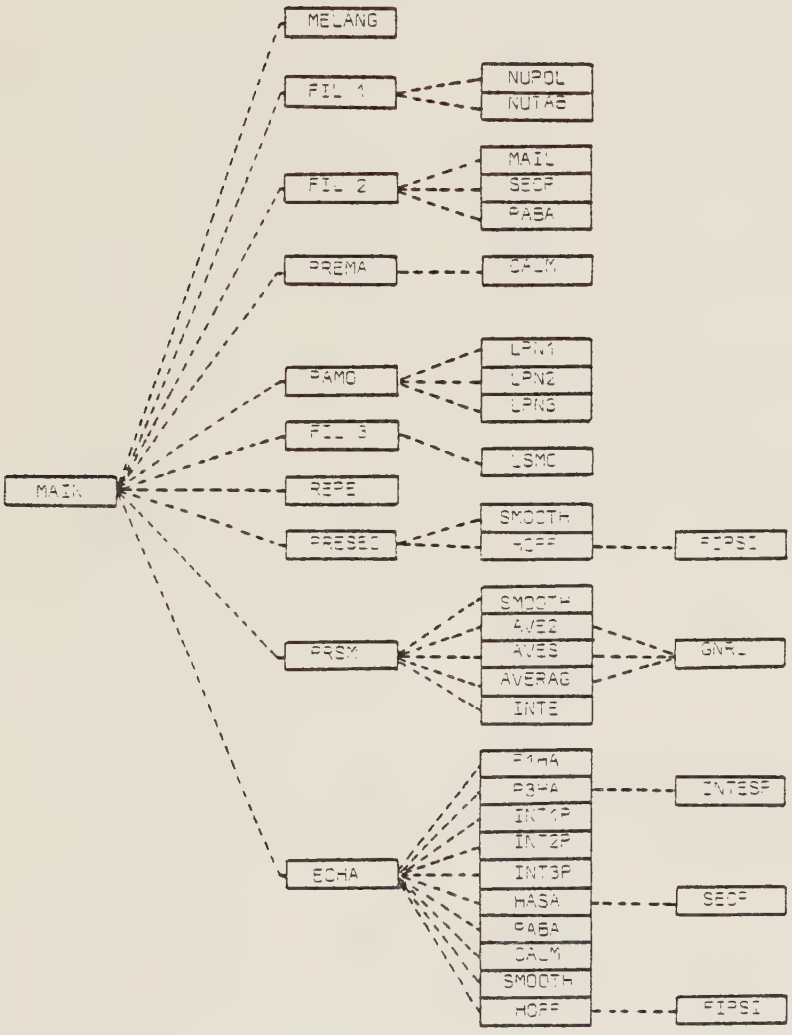
Pour la tabulation des taux de réaction effectifs d'un isotope ayant N_e échantillons, pour N_T températures et N_σ sections équivalentes il fallait :

$(1 + N_e) * N_T$ passages du programme CARLERESONNE [13]

$(1 + N_e) * N_T * N_\sigma$ passages du programme SECOL [12]

Ce travail demandait également diverses manipulations pour assurer l'enchaînement des calculs entre ces deux programmes et la mise sous forme EFFELIB des résultats.
(Les encombrements mémoires des programmes CARLERESONNE et SECOL sont respectivement de 400 K et 500 K en moyenne).

ORGANISATION LOGIQUE DU PROGRAMME AUTOCAR



Rôle des principaux sous programmes

MAIN : Gérer l'ensemble du programme

MELANG : Construire, à partir des données ENDF de plusieurs isotopes, un jeu de données de même format pour un mélange de ces isotopes qui sera utilisé dans la suite du programme.

FIL 1 : Lire les données de la file 1 ENDF et gérer le calcul des $\bar{\nu}$ (nombre moyen de neutrons par fission) effectué par NUPOL et NUTAB.

FIL 2 : Lire les données de la file 2 ENDF en ce qui concerne les paramètres des résonances résolues.

Gérer le calcul du macromaillage de sortie des taux de réaction effectifs correspondant au domaine résolu effectué par MAIL.

Gérer le calcul des sections potentielles " s " et " p " effectué par SECP.

Gérer le calcul des pas de base sur chaque macrogroupe effectué par PABA. PABA calcule aussi les pas de base dans les échantillons.

PREMA : Gérer le calcul du maillage fin dans chaque macrogroupe effectué par CALM. CALM calcul aussi le maillage fin dans les échantillons.

PAMO : Lire les données de la file 2 ENDF en ce qui concerne les paramètres de résonances moyens dans le domaine non résolu avec LPN1, LPN2 et LPN3.

FIL 3 : Lire les données de la file 3 ENDF (sections correctives) avec LSMO.

REPE : Repérer les énergies auxquelles sont données les sections correctives par rapport au macromaillage.

PRESEC : Gérer le calcul des sections efficaces effectuw par HOFF avec le formalisme BREIT-WIGNER, l'effet Doppler étant calculé soit directement dans HOFF soit par FIPSI. L'addition des sections correctives aux sections BREIT-WIGNER est effectuée par SMOOTH.

PRSM : Gérer le calcul des sections efficaces moyennes dans le domaine non résolu effectué par AVE2, AVES, AVERAG et GNRL. L'interpolation de ces sections sur le macromaillage est effectuée par INTE.

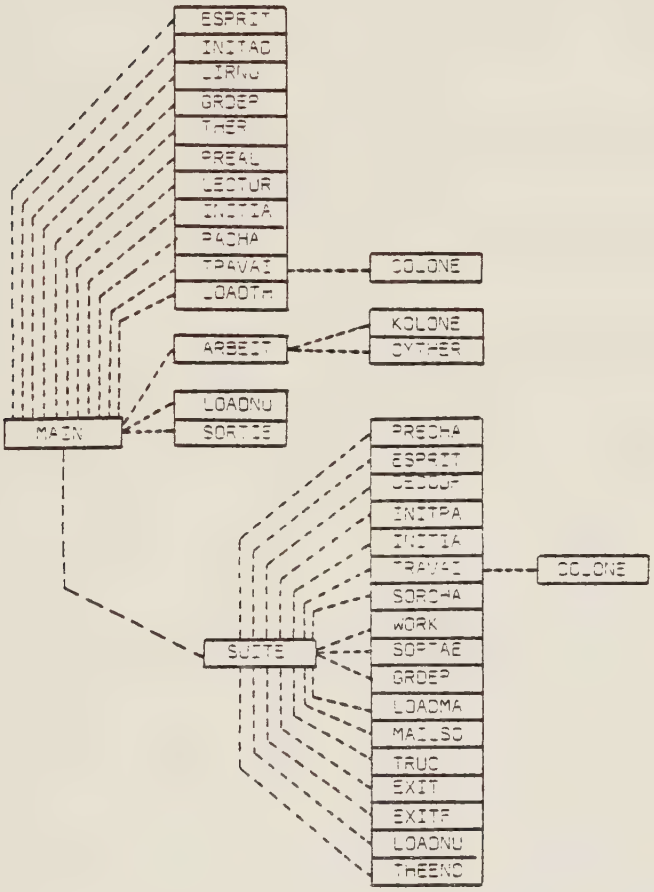
ECHA : Gérer le calcul général dans les échantillons du domaine non résolu.

P1 HA, P3 HA : Calculer la largeur et la position en énergie sur le domaine non résolu des échantillons. L'interpolation des espacements moyens des résonances, nécessaires à ce calcul, est effectué par INTESP.

INT1P, INT2P, INT3P : Interpoler les paramètres moyens des résonances non résolues dans chaque échantillon.

HASA : Effectuer le tirage au hasard de paramètres de résonance dans chaque échantillon.

ORGANISATION LOGIQUE DU PROGRAMME AUTOSEC



Rôle des principaux sous programmes

MAIN : Gérer l'ensemble du calcul des taux de réaction effectifs dans le domaine résolu.

ESPRIT : Calculer le bloc élémentaire de base des probabilités de ralentissement

INITAD : Initialiser l'adresse des blocs élémentaires des probabilités de ralentissement

INITPA : Initialiser les calculs sur le bloc élémentaire de base des probabilités de ralentissement

LIRNU : Lire les $\bar{\nu}$ calculés par AUTOCAR

GROEP : Calculer le numéro du groupe de départ de la tabulation par rapport au maillage général de sortie des taux de réaction effectifs

THER : Déterminer le nombre de groupes appartenant à la zone thermique du maillage général de sortie

PREAL : Déterminer le nombre de groupes fins nécessaires simultanément au calcul de ralentissement dans chaque macrogroupe.

LECTUR : Lire le maillage fin et les sections efficaces calculés par AUTOCAR pour chaque macrogroupe

INITIA : Calculer la source d'initialisation du calcul de ralentissement

PACHA : Déterminer le pas élémentaire du calcul pour chaque macrogroupe et en déduire le bloc des probabilités élémentaires de ralentissement à utiliser.

TRAVAI : Calculer les taux de réaction effectifs par résolution de l'équation de ralentissement discrétisée.

COLONE : Calculer les probabilités de ralentissement sur le maillage fin

LOADTH : Charger les largeurs en léthargie des groupes thermiques du maillage de sortie

ARBEIT : Calculer les taux de réaction effectifs par résolution de l'équation de ralentissement discrétisée dans la zone thermique du maillage de sortie.

KOLONE : Calculer les probabilités de ralentissement sur le maillage fin dans la zone thermique du maillage de sortie.

CYTHER : Découper la zone thermique du calcul de ralentissement en groupes du maillage de sortie

LOADNU : Charger les $\overline{\nu}$ sur le maillage de sortie

SORTIE : Imprimer les taux de réaction effectifs calculés sur les groupes de sortie du domaine résolu

SUITE : Gérer l'ensemble du calcul des taux de réaction effectifs dans le domaine non résolu et le résultat final

PRECHA : Déduire et imprimer les sections effectives provenant du domaine résolu et formant le premier échantillon

DECOUP : Découper en énergie un échantillon en une zone source et une zone de calcul

SORCHA : Imprimer les taux de réaction effectifs calculées sur les échantillons sans approximation sur l'opérateur de ralentissement

WORK : Calculer les taux de réaction effectifs sur les échantillons avec approximation sur l'opérateur de ralentissement

SORTAE : Imprimer les résultats du calcul WORK

LOADMA : Charger les largeurs en léthargie des groupes du maillage de sortie correspondant au domaine non résolu

MAILSO : Calculer les points d'interpolation des facteurs d'autoprotection

TRUC : Calculer les taux de réaction effectifs sur le maillage de sortie du domaine non résolu par interpolation des résultats obtenus sur les échantillons

EXIT, EXITF : Charger les taux de réaction effectifs sur les groupes de sortie du domaine non résolu

THEEND : Imprimer et mettre sur bande le résultat complet du calcul AUTOSECOL

ANNEXE 6

PLUTONIUM

TAUX DE REACTION EFFECTIFS

Nous présentons ici les résultats de la tabulation des taux de réaction effectifs à 20 °C et 1000 °C des isotopes 239, 240 et 241 du Plutonium pour les valeurs suivantes de la section équivalente :

- 40 barns et 10^7 b.

Le maillage en énergie est celui représenté au § 4-1-1, sauf pour le dernier groupe et avec une numérotation différente.

Pour le Pu 239 le 1er groupe de ces résultats correspond au groupe 22 du tableau du § 4-1-1. Les limites en énergie du groupe 32 de ces résultats sont : 2.7679 eV - 1 eV.

Pour le Pu 240 et le Pu 241 le 1er groupe de ces résultats correspond au groupe 21 du tableau du § 4-1-1. Les limites en énergie du groupe 33 de ces résultats sont pour le Pu 240 : 2.7679 eV - 0.5 eV, et pour le Pu 241 : 2.7679 eV - 1.8 eV.

TAUX DE REACTION EFFECTIFS

Pu 239 - T = 20 °C

SECTION EQUIVALENTE : 40.00000

MACROGROUPE	SIGMA DIFFUSION	SIGMA ABSORPTION	SIGMA FISSION	SIGMA PRODUCTION
1	10.28373	2.16767	1.55030	4.46331
2	10.36772	2.44879	1.60966	4.63100
3	10.51193	2.76177	1.75432	5.04687
4	10.75053	3.23062	1.97830	5.69686
5	10.65475	3.76602	2.07906	5.97528
6	11.14123	4.81285	2.62894	7.55557
7	10.25496	4.72529	2.20423	6.33496
8	9.42184	5.61027	3.66855	10.54352
9	9.30992	6.46546	3.69652	10.62380
10	10.21972	9.30161	5.46677	15.79222
11	8.65485	7.64591	4.35656	12.51755
12	9.85879	12.23852	6.47735	18.44458
13	8.23401	11.20916	6.69504	19.23743
14	7.40309	14.58045	9.51364	27.33353
15	6.52851	17.55522	13.40095	38.50990
16	4.21045	24.72572	20.11452	57.78902
17	5.40120	17.21494	8.97014	25.77119
18	5.72968	11.20668	2.60197	7.47547
19	6.66727	9.25938	2.58132	8.56533
20	6.85725	9.29054	4.39637	12.63078
21	9.69049	13.61751	8.10666	23.29042
22	6.30829	13.51622	8.29005	23.81731
23	3.36131	37.29576	19.05562	54.74677
24	4.22182	21.35940	12.51836	35.96521
25	2.74911	21.27150	16.25545	46.70187
26	4.11809	15.70064	10.45940	30.18476
27	5.82785	10.77456	7.53837	21.65773
28	6.56869	7.32031	6.55606	18.84416
29	7.06359	7.37215	6.80564	19.56407
30	7.17792	7.62759	7.28580	21.23088
31	7.13702	9.10651	8.47221	24.34064
32	5.83270	15.42227	12.05696	34.75426

TAUX DE REACTION EFFECTIFS

Pu 239 - T = 20 °C

SECTION EQUIVALENTE : 100000.00000

PARAGROUPE	SIGEF DIFFUSION	SIGEF ABSORPTION	SIGEF FISSION	SIGEF PRODUCTION
1	10.56399	2.35620	1.69430	4.88364
2	11.18599	2.71530	1.75240	5.15673
3	11.47699	3.14499	2.00569	5.76809
4	12.02999	3.80920	2.13733	6.14473
5	12.37609	4.74673	2.55252	7.45099
6	12.70013	6.56556	3.54773	10.19618
7	12.95325	6.66752	3.12936	8.99377
8	12.69236	5.42226	5.70096	16.38455
9	13.15244	11.26739	6.19771	17.81221
10	16.12563	19.11375	10.72543	30.81413
11	13.21765	14.26878	8.62142	24.79907
12	18.58580	32.56544	15.97671	45.90106
13	15.26555	31.96426	17.21709	49.46468
14	14.64791	42.28456	22.94402	65.91814
15	19.64503	85.46526	57.51237	165.23212
16	14.18795	120.62170	88.35134	253.83247
17	17.25858	85.20908	30.78465	88.44427
18	15.56509	87.09546	13.40851	38.52264
19	7.70356	8.55793	4.45665	12.80482
20	9.46071	35.22479	18.81210	54.61600
21	10.41614	82.70152	50.02324	143.71672
22	11.74737	88.55135	44.63071	128.22398
23	11.03150	217.44207	126.45567	363.30688
24	10.69518	138.47247	64.85912	186.34018
25	7.64810	214.56619	166.89455	479.46779
26	9.76054	193.61840	106.31152	305.43396
27	7.95156	16.27159	11.07968	31.82042
28	8.52100	8.66195	8.02958	23.06598
29	8.66153	9.04004	8.38030	23.99040
30	8.95346	9.85169	9.22081	26.49139
31	9.24112	11.79879	10.97587	31.53281
32	9.64104	26.26708	20.86188	59.93614

TAUX DE REACTION EFFECTIFS

Pu 239 - T = 1000 °C

SECTION EQUIVALENTE : 40.00000

PARENGROUPE	SIGEF DIFFUSION	SIGEF ABSORPTION	SIGEF FISSION	SIGEF PRODUCTION
1	10.30922	2.22746	1.57363	4.53049
2	10.43371	2.48561	1.63816	4.71299
3	10.56736	2.84154	1.79247	5.15513
4	10.84344	3.31545	1.85128	5.32243
5	10.77939	3.92364	2.13433	6.13406
6	11.28533	5.00338	2.70629	7.77787
7	10.40783	4.96012	2.27797	6.54698
8	9.57362	6.21805	3.80355	10.93255
9	9.46603	6.86922	3.84375	11.05267
10	10.24515	5.91661	5.71321	16.41403
11	8.58792	8.28192	4.56631	13.11951
12	9.87913	12.30614	6.68022	19.19225
13	8.15164	12.64803	7.27290	20.89502
14	7.29806	16.23326	9.80238	28.17084
15	6.51855	18.66467	13.49421	38.76884
16	4.10284	25.49565	20.26485	58.50819
17	5.21673	19.93287	9.23982	26.54602
18	5.57421	13.05670	2.71941	7.81285
19	6.57857	5.73865	3.12785	8.98630
20	6.62867	10.50375	4.85097	13.93423
21	5.73428	14.59221	8.66242	24.88712
22	6.10814	14.50594	8.66534	24.89804
23	2.45326	27.93282	19.22572	55.23547
24	4.60597	22.40724	12.72663	36.56360
25	7.66983	21.58584	16.49345	47.38567
26	3.96025	20.57518	10.95237	31.46613
27	5.77804	11.00527	7.65166	21.98320
28	6.66771	7.32277	6.56026	18.84760
29	7.04336	7.37231	6.80596	19.56508
30	7.17780	7.92303	7.26907	21.23166
31	7.13772	9.10706	8.47256	24.34166
32	5.82996	15.42608	12.09910	34.76370

TAUX DE REACTION EFFECTIFS

Pu 239 - T = 1000 °C

SECTION EQUIVALENTE = 1000000.00000				
MACROGROUPE	SIGEF DIFFUSION	SIGEF ABSORPTION	SIGEF FISSION	SIGEF PRODUCTION
1	10.64399	2.35620	1.69630	4.88364
2	11.18410	2.71530	1.79240	5.15473
3	11.47698	3.16499	2.00560	5.76809
4	12.02809	3.80819	2.13730	6.14472
5	12.27609	4.74673	2.59252	7.45089
6	13.70011	6.56555	3.54773	10.19617
7	11.65327	6.86754	3.12536	8.99178
8	12.65291	9.42223	5.70094	16.38449
9	13.15245	11.28738	6.19771	17.81221
10	16.12940	19.11271	10.72540	30.81407
11	13.21762	16.76674	8.63140	24.79800
12	14.58572	32.56529	15.97663	45.90085
13	15.25963	31.66228	17.07884	49.06749
14	14.67985	42.35902	22.99769	66.05797
15	16.57894	85.10701	57.41986	164.96721
16	14.09610	125.65000	87.87901	252.47632
17	17.21038	89.66074	30.96775	89.02777
18	15.55484	87.09012	13.40662	38.52669
19	7.72297	6.57233	4.46704	12.83381
20	9.40233	25.02856	19.00672	54.61490
21	10.42590	83.70435	50.02458	143.72258
22	11.04677	98.56508	44.84861	128.27541
23	12.52419	217.25558	126.40456	363.16016
24	10.75109	141.23548	67.08459	192.73398
25	7.57727	217.17450	164.71265	473.21924
26	5.77545	197.67517	105.81125	303.99961
27	7.93537	17.22737	11.58765	33.29129
28	8.53047	8.96567	8.03168	23.07503
29	8.66141	9.04059	8.35088	23.99208
30	8.95743	9.89230	9.22128	26.49971
31	9.24116	11.79971	10.97623	31.53470
32	9.64145	26.87582	20.67094	59.96219

TAUX DE REACTION EFFECTIFS

Pu 240 - T = 20 °C

SECTION EQUIVALENTE : 40.00000

MACROGROUPE	SIGEF DIFFUSION	SIGEF ABSORPTION
1	12.48448	0.70215
2	13.01044	0.89745
3	12.93507	0.98675
4	12.84071	1.06786
5	12.90962	1.20679
6	12.96752	1.27589
7	13.80598	1.66861
8	13.01733	1.91082
9	12.17438	2.00268
10	11.86574	2.12877
11	10.29389	2.52488
12	11.00371	2.75256
13	10.29195	1.46329
14	10.85890	2.82447
15	11.81928	4.43496
16	13.70814	4.38708
17	5.57962	5.12521
18	8.65760	0.29071
19	13.89519	13.30047
20	2.52618	1.01163
21	6.15024	0.21635
22	8.04411	4.00164
23	5.27213	4.01318
24	7.42152	0.24520
25	8.08486	0.24651
26	8.65133	0.32472
27	9.22857	0.47605
28	9.86217	0.74147
29	10.58280	1.20421
30	11.40950	2.02305
31	12.33281	3.45556
32	13.25913	6.16103
33	6.25126	30.24658

TAUX DE REACTION EFFECTIFS

Pu 240 - T = 20 °C

SECTION EQUIVALENTE : 1CC00CD0.00000

MACROGROUPE	SIGEF DIFFUSION	SIGEF ABSORPTION
1	13.05599	0.74829
2	13.80899	0.58282
3	14.16499	1.15050
4	14.67215	1.22091
5	15.39854	1.56565
6	15.65094	1.74260
7	17.85040	2.50236
8	18.13705	2.64936
9	18.70409	3.49627
10	20.46761	5.56751
11	16.82096	5.72066
12	18.68470	6.70091
13	25.31444	7.40710
14	18.08598	14.72232
15	43.78082	27.34265
16	43.24228	47.54599
17	162.50810	83.23211
18	8.77021	0.29477
19	154.63828	256.77515
20	2.97909	1.06747
21	6.19543	0.21800
22	13.57487	54.09634
23	8.03296	46.79778
24	7.47357	0.24693
25	8.14013	0.24820
26	8.72744	0.32760
27	9.34587	0.48217
28	10.05611	0.75626
29	10.92150	1.24352
30	12.03173	2.12560
31	13.53609	3.84453
32	15.71422	7.32283
33	395.77686	4797.85156

TAUX DE REACTION EFFECTIFS

Pu 240 - T = 1000 °C

SECTION EQUIVALENTE : 40.00000

MACROGROUPE	SIGEF DIFFUSION	SIGEF ABSORPTION
1	11.61375	0.71506
2	13.21082	0.93178
3	13.22677	1.05281
4	13.20026	1.15441
5	13.36008	1.21271
6	13.09843	1.40143
7	14.35834	1.58832
8	13.83644	2.15635
9	14.94037	2.28075
10	12.89921	3.01013
11	10.85181	3.12993
12	11.51073	3.64087
13	10.80976	3.94204
14	11.22935	3.51709
15	12.40295	3.72130
16	14.17425	3.49249
17	10.69963	3.65998
18	8.65906	0.29125
19	14.76536	15.36226
20	2.52286	1.03550
21	6.15008	0.21652
22	7.75288	4.85593
23	5.35018	4.80292
24	7.42131	0.24535
25	8.08488	0.24456
26	8.65145	0.32478
27	5.22877	0.47617
28	5.86250	0.74172
29	10.58331	1.20487
30	11.41027	2.02438
31	12.33389	3.46882
32	13.26022	6.16604
33	6.23814	30.35796

TAUX DE REACTION EFFECTIFS

Pu 240 - T = 1000 °C

SECTION EQUIVALENTE = 100000CO.COOOO		
MACROGROUPE	SIGEF DIFFUSION	SIGEF ABSORPTION
1	13.05599	0.74825
2	13.80899	0.58282
3	14.16499	1.15050
4	14.67215	1.22091
5	15.39856	1.56566
6	15.65092	1.74260
7	17.73227	2.47348
8	18.12016	2.56280
9	18.67067	3.49131
10	20.54911	5.56305
11	16.84506	5.75752
12	18.56817	6.63302
13	25.32945	7.49110
14	18.09425	14.72725
15	43.80176	37.37215
16	43.28920	41.53883
17	162.39969	83.21639
18	8.77190	0.29533
19	154.50606	258.80151
20	2.57576	1.09247
21	6.19529	0.11813
22	13.06166	52.12900
23	8.53913	46.77773
24	7.47340	0.24709
25	8.14018	0.24825
26	8.72758	0.32766
27	9.34611	0.48229
28	10.05651	0.75652
29	10.92220	1.24412
30	12.03298	2.13708
31	13.53849	3.84844
32	15.71931	7.34525
33	348.05566	4825.61797

TAUX DE REACTION EFFECTIFS

Pu 241 - T = 20 °C

SECTION EQUIVALENTE : 40.00000				
PARAGRAPHE	SIGEF DIFFUSION	SIGEF ABSORPTION	SIGEF FISSION	SIGEF PRODUCTION
1	10.04955	2.65644	2.39189	6.99562
2	10.19341	3.13208	2.54037	7.45598
3	10.28793	3.47695	2.76021	8.18648
4	10.39401	4.09873	3.25609	9.65333
5	10.46536	4.84628	3.82724	11.22530
6	10.46891	5.78684	4.54624	13.34291
7	10.31960	6.66593	5.24002	15.38697
8	10.06032	7.36048	5.79976	17.01074
9	9.70229	8.18271	6.39793	16.75873
10	9.53160	9.35137	7.26267	21.29255
11	9.24884	11.12758	8.60321	25.22459
12	8.90164	13.04758	10.10112	29.61647
13	8.45463	14.56666	11.32057	33.19188
14	7.96912	15.11040	11.80510	34.61255
15	7.55030	16.14638	12.44830	36.64500
16	7.26054	17.04261	13.04912	40.01921
17	6.96856	16.18556	13.12758	38.49414
18	6.21357	18.60060	16.51112	48.41060
19	7.55991	13.15918	11.92098	34.95229
20	6.61333	16.33046	18.09808	53.06355
21	4.51690	24.61619	22.71150	66.59010
22	5.79170	16.10750	16.11487	47.24878
23	8.15479	16.36620	10.55052	30.93411
24	2.85282	31.42362	27.12172	79.52086
25	3.47478	24.01558	18.88809	55.37487
26	3.01759	28.72105	27.11772	79.50912
27	2.09178	31.64297	28.69515	84.01698
28	1.12460	35.42165	33.89960	99.38187
29	1.24794	33.98839	32.88592	96.42119
30	1.63437	33.58531	25.34415	74.31487
31	2.30162	25.76602	21.42200	62.80927
32	3.64595	16.27283	17.89845	52.47002
33	4.88160	10.55278	15.45225	45.30597

TAUX DE REACTION EFFECTIFS

Pu 241 - T = 20 °C

SECTION EQUIVALENTE : 100000.00000

MACROGROUPE	SIGEF DIFFUSION	SIGEF ABSORPTION	SIGEF FISSION	SIGEF PRODUCTION
1	10.87799	3.14090	2.56370	7.54832
2	11.09599	3.42330	2.77760	8.15225
3	11.31699	3.85650	3.03410	9.07698
4	11.65590	4.69620	3.73010	10.94411
5	12.02900	5.48170	4.63200	13.58800
6	12.40815	7.48239	5.86207	17.19344
7	12.69106	9.20864	7.19063	21.09712
8	12.61312	10.86010	8.48106	24.78700
9	12.69215	12.35716	9.94142	29.14924
10	12.77018	15.94823	12.20917	35.79729
11	13.27029	21.10745	16.02934	46.99902
12	13.69126	27.23452	21.08935	61.83406
13	13.83133	34.65382	26.25562	76.98143
14	13.17036	38.76701	29.39777	86.19421
15	11.26742	45.60841	34.20406	100.28625
16	11.65438	56.33054	41.80414	122.56069
17	12.32138	50.12051	39.11818	114.69446
18	12.25643	65.12629	56.38096	165.30899
19	11.91340	37.78424	32.45511	98.09035
20	12.82121	53.16548	46.53580	145.23891
21	12.53250	126.57716	117.94125	345.80347
22	11.06234	60.26766	51.55675	151.16434
23	17.65959	103.69826	51.47411	150.92203
24	18.69257	326.44263	280.32948	821.91455
25	10.92494	166.42976	113.65125	333.22534
26	10.61883	137.51377	130.21461	381.78906
27	10.60874	214.97366	184.29510	540.35303
28	11.38785	371.35010	353.06472	1035.24390
29	8.43226	273.07056	265.25366	777.73939
30	11.00400	477.85203	325.54175	954.48804
31	6.07031	77.65445	64.22864	188.31490
32	7.62078	37.41456	24.73223	101.83780
33	8.33402	28.30937	26.42865	77.48877

TAUX DE REACTION EFFECTIFS

Pu 241 - T = 1000 °C

SECTION EQUIVALENTE : 40.00000

MACROGROUPE	SIGEF DIFFUSION	SIGEF ABSORPTION	SIGEF FISSION	SIGEF PRODUCTION
1	10.02529	2.60445	2.38923	7.01715
2	10.20317	3.14633	2.65275	7.49232
3	10.30594	3.50518	2.81174	8.24965
4	10.41567	4.13812	3.28776	9.84629
5	10.48253	4.89559	3.86656	11.34061
6	10.48218	5.83045	4.59812	13.48630
7	10.32742	6.74758	5.29889	15.56165
8	10.07174	7.48204	5.86824	17.21153
9	9.77663	8.29032	6.47694	18.99037
10	9.49384	9.48035	7.35462	21.56461
11	9.22540	11.28511	8.71328	25.54733
12	8.86596	13.23528	10.22950	30.00246
13	8.40988	14.78209	11.46501	33.61539
14	7.91395	15.35247	11.96289	35.07518
15	7.44868	16.41489	12.66020	37.14214
16	7.18222	17.64058	13.83290	40.55217
17	6.85843	16.48529	13.22297	38.80609
18	6.13902	16.61438	16.75202	49.11934
19	7.46342	11.44885	12.15984	35.64969
20	6.52790	18.61362	18.25104	53.80524
21	4.24581	22.02267	23.27956	68.25563
22	5.57220	15.52097	16.76270	49.14421
23	7.81473	17.60838	10.93639	32.06568
24	2.71009	32.10208	27.42117	80.98524
25	3.37003	24.56595	19.18653	56.25504
26	2.69483	28.80643	27.18724	79.71207
27	2.01273	32.13460	28.76559	84.34073
28	1.29497	35.51467	33.65479	98.56126
29	1.24692	34.00446	32.86850	96.45836
30	1.50941	33.55132	25.45399	74.63109
31	7.27036	28.48506	21.42385	62.81482
32	3.64328	19.28320	17.90259	52.49037
33	4.88109	16.55656	15.45535	45.31506

TAUX DE REACTION EFFECTIFS

Pu 241 - T = 1000 °C

SECTION EQUIVALENTE : 100.00000

MACROGROUPE	SIGEF DIFFUSION	SIGEF ABSORPTION	SIGEF FISSION	SIGEF PRODUCTION
1	10.47799	3.14090	2.58375	7.58832
2	11.08543	3.42330	2.77760	8.15225
3	11.31699	3.85650	3.09410	9.07808
4	11.65500	4.65620	3.73010	10.94411
5	12.02908	5.85174	4.63283	13.58909
6	12.40805	7.48633	5.85902	17.19330
7	12.80305	9.20963	7.19085	21.09910
8	12.61317	10.86014	8.45111	24.76799
9	12.60214	12.85715	9.94141	29.14821
10	12.77017	15.94621	12.20916	35.78724
11	13.23029	21.10742	16.10933	46.09797
12	13.69425	27.82450	21.28677	61.53-01
13	13.83125	34.65372	26.35554	76.99125
14	13.37037	38.76704	29.39780	86.19431
15	13.26737	45.80024	34.20390	100.28594
16	13.65635	56.33043	41.80406	122.56647
17	13.33140	53.12061	39.11826	114.49465
18	12.25837	65.12697	56.38071	165.30816
19	11.91342	37.78432	33.45517	98.09053
20	12.83718	53.00785	46.36148	144.72781
21	12.72673	127.19246	118.13542	346.37280
22	11.56106	60.07644	51.43755	150.81483
23	17.62710	104.55201	52.30316	153.35781
24	18.60134	321.23511	280.50430	822.44095
25	10.82966	164.92774	112.80927	330.75459
26	10.62534	127.53126	129.82540	380.66896
27	10.60647	215.53320	184.82993	541.84751
28	11.37343	271.20502	352.94800	1034.34302
29	8.44569	272.81763	264.68066	776.97383
30	11.61558	472.66567	322.78631	946.41797
31	8.05799	82.81056	67.13694	196.69203
32	7.61943	37.45535	34.76530	101.93184
33	8.23384	26.32069	26.43842	77.51741

ANNEXE 7

AUTOPROTECTION DU HAFNIUM NATUREL

L'importance de l'interférence entre les résonances des isotopes composant le Hafnium naturel nous a conduit à la tabulation des taux de réactions effectifs pour ce corps.

Nous considérons le mélange suivant :

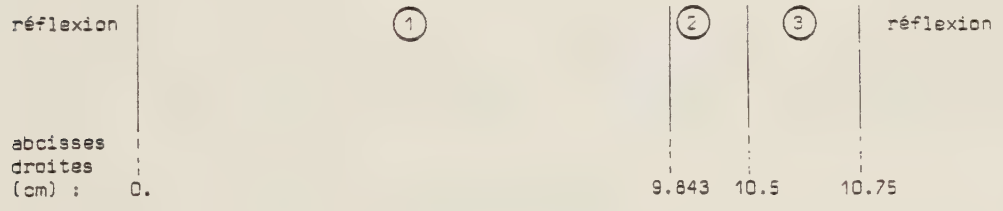
Hf 176 : 5,21 %
Hf 177 : 18,54 %
Hf 178 : 27,25 %
Hf 179 : 13,83 %
Hf 180 : 35,17 %

Nous négligeons la présence du Hf 174 (0,17 %).

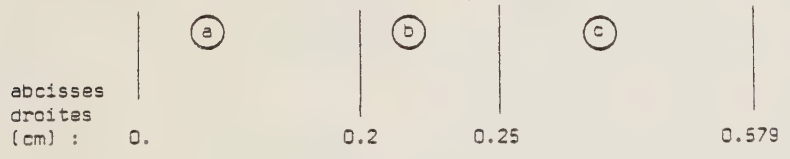
Les taux de réaction effectifs ont été calculés à 20 °C et 500 °C pour 11 valeurs du paramètre σ_e.

Nous présentons ici les résultats de tests sur un calcul de cellule par le programme APOLLO afin de comparer les résultats obtenus en considérant d'une part les isotopes du Hafnium pris séparément dans le traitement de l'autoprotection, d'autre part, en utilisant la tabulation du Hafnium naturel.

La géométrie des calculs est la suivante :



La zone 1 est constituée de 17 motifs définis de la façon suivante :



La composition de chaque zone est la suivante (10^{-24}) atomes/cm3) :

(a) U 238 : 2.0816×10^{-2}
U 235 : 7.2597×10^{-4}
O : 4.3098×10^{-2}
Zr : 2.4299×10^{-3}

(b) Zr : 4.2051×10^{-2}

(c) H_2O : 3.3562×10^{-2}

(2) H_2O : 3.3562×10^{-2}

(3) Hf nat : 4.4233×10^{-2}

ou :

Hf 176 : 2.3032×10^{-3}
Hf 177 : 8.2404×10^{-3}
Hf 178 : 1.2090×10^{-2}
Hf 179 : 5.7779×10^{-3}
Hf 180 : 1.5822×10^{-2}

Nous donnons les résultats concernant le keff, le flux dans la zone du Hafnium, les sections moyennes d'absorption et les taux de réaction pour l'absorption du Hafnium.

Le groupe d'énergie considéré est défini par les limites 2.7679 eV et à 1.0104 KeV qui correspondent à la zone des résonances épithermiques des isotopes du Hafnium.

Les calculs ont été faits dans les quatre cas suivants :

1 - Calcul considérant séparément les isotopes du Hafnium au niveau du calcul de l'autoprotection.

2 - Calcul identique au précédent mais avec une itération générale sur le calcul de l'autoprotection. Ceci est réalisé dans le but de supprimer l'effet de l'ordre dans lequel on traite l'autoprotection de chaque isotope et de prendre en compte la partie macroscopique de l'effet d'interférence.

3 - Calcul identique au précédent avec deux itérations.

N - Calcul utilisant la tabulation des taux de réactions effectifs du Hafnium naturel.

K effectif			
Cas .		Cas N	Δ (. - N) pcm
1	1.1841092		- 253.37
2	1.1854209	1.1866429	- 122.2
3	1.1854368		- 120.61

Flux - Zone Hafnium			
Cas .		Cas N	$\Delta: \frac{N - \cdot}{N} \times 100$
1	0.054674	0.056978	+ 4.04
2	0.055591		+ 2.43
3	0.055620		+ 2.38

Section moyenne d'absorption								
Cas .							Cas N	Δ
	Hf 176	Hf 177	Hf 178	Hf 179	Hf 180	Hf nat.	Hf nat.	$\frac{N - \cdot}{\cdot} \times 100$
1	13.324	39.095	8.975	24.547	1.4205	14.281		- 11.17
2	12.701	36.225	9.153	23.948	1.4172	13.681	12.845	- 6.5
3	12.662	36.116	9.1736	23.939	1.4170	13.665		- 6.37

Taux de réaction - absorption								
Cas .							Cas N	Δ
	Hf 176	Hf 177	Hf 178	Hf 179	Hf 180	Hf nat.	Hf nat.	$\frac{N - \cdot}{\cdot} \times 100$
1	2.4749×10^{-3}	2.5980×10^{-2}	8.7505×10^{-3}	1.1436×10^{-2}	1.8125×10^{-3}	5.0456×10^{-2}		- 5.65
2	2.3986×10^{-3}	2.4477×10^{-2}	9.0737×10^{-3}	1.1346×10^{-2}	1.8386×10^{-3}	4.9134×10^{-2}	4.7757×10^{-2}	- 2.88
3	2.3963×10^{-3}	2.4417×10^{-3}	9.0989×10^{-3}	1.1348×10^{-2}	1.8394×10^{-3}	4.9100×10^{-2}		- 2.81

L'ensemble de ces résultats montrent que l'effet d'interférence sur le taux de réaction pour l'absorption du Hafnium naturel est globalement de l'ordre de 6 %. Les itérations sur le traitement de l'autoprotection de chaque isotope du Hafnium, permettent de prendre en compte la moitié de l'effet d'interférence. Les 3 % d'écart qui subsistent montrent que l'interférence qui se situe au niveau de la structuve fine ne peut être correctement traité en considérant les isotopes séparément dans le calcul de l'autoprotection par le programme APOLLO. Seule la tabulation directe des taux de réaction effectif du Hafnium naturel conduit à des résultats corrects.

ANNEXE 8

SECTIONS AUTO-PROTEGEES DU PU 240 DANS LE DOMAINE THERMIQUE

Energies (eV)	$\bar{\sigma}_a$ (20°C)	$\tilde{\sigma}_a$ (20°C)	$\tilde{\sigma}_a$ (400°C)	$\tilde{\sigma}_a$ (1000°C)
2.02	40.284	40.036	40.115	40.221
1.93	51.330	51.325	51.446	51.623
1.84	65.304	65.294	65.476	65.747
1.755	84.723	84.703	84.993	85.420
1.67	112.745	112.130	112.605	113.304
1.59	157.557	157.475	158.347	159.665
1.51	227.643	227.454	229.157	231.865
1.44	335.894	335.377	338.973	344.542
1.37	524.259	522.850	531.263	544.394
1.305	978.609	969.563	998.624	1048.44
1.235	2385.01	2302.42	2489.56	2879.22
1.17	8695.09	7387.6	8944.84	11071.1
1.11	57299.7	34580.4	35682.6	35908.9
1.07	105361.	56406.	52523.7	47566.
1.035	40851.9	22308.9	25426.	28466.8
0.986	6668.46	5659.41	6399.51	7684.98
0.93	2068.23	2023.12	2101.86	2243.61
0.86	992.207	986.27	1000.93	1023.79
0.79	580.761	579.382	583.479	589.902
0.705	378.904	378.560	379.995	382.109
0.625				

$\bar{\sigma}$ section moyenne . $\tilde{\sigma}$ section auto-protégée

REFERENCES

[1] A. HOFFMANN - F. JEANPIERRE - A. KAVENOKY - M. LIVOLANT - H. LORAIN -
Code APOLLO - Code multigroupe de résolution de l'équation du transport pour les neutrons thermiques et rapides -
Rapport SERMA T 1193 (1972)

[2] F. JEANPIERRE - Méthode de calcul des section effectives des corps résonnants lourds en géométrie Hétérogène -
Application à l'Uranium 238 -
Rapport SPM 1095 (1969) (Thèse 3è Cycle Orsay)

[3] M. LIVOLANT - F. JEANPIERRE - Autoprotection des résonances dans les réacteurs nucléaires -
Application aux isotopes lourds -
Rapport CEA R.4533 (1974)

[4] K. GREGSON - M.F. JAMES - D.S. NORTON - MBLW .
A multi Level Breit Wigner computer program
AEEW M517 (1965)

[5] A. SANTAMARINA - Calcul de l'absorption résonnante des neutrons par les isotopes de l'uranium et du plutonium dans un réacteur nucléaire.
Thèse 3è Cycle Orsay (1973)

[6] A.M. LANE & J.E. LYNN - Proc. Phys. Soc.
A70, 557 (1957)

[7] P. GREEBLER and B.A. HUTCHINS - Proc of the seminar on physics of fast and intermediate reactors -
IAEA, Vienna (1962) Vol.3, p.121 -

[8] BNL - Data formats and procedure for the ENDF neutron cross section Library -
ENDF - 102 - Vol.1 (1970)

[9] The Pseudo code GA 7136 - Gulf General Atomic (1966)

[10] M. GRANDOTTO - Calcul de l'autoprotection des résonances - Application au Plutonium 241 -
Stage DEA - Physique des réacteurs

[11] GRENECHE - Thèse 3è Cycle Orsay

[12] M. LIVOLANT - Code RACOLE -
Note SPM 649 (1968)

[13] A. HOFFMAN - Programme de calcul des sections efficaces -
Note SPM 559 (1967)

[14] J. KREBS - G. LE COQ - P. RIBON
Evaluation des sections efficaces neutroniques des isotopes stables du Hf.
DPRMA - CEN SACLAY (Nov. 1974)

[15] J. GONNORD
Qualification des sections efficaces des isotopes Hf d'APOLLO à l'aide du code Monte Carlo TRIPOLI.
Rapport SERMA S n° 252

[16] L. BOURDET - S. KATZ - J.C. NIMAL - T. VERGNAUD
Programme de Monte Carlo à trois dimensions polycinétique TRIPOLI.
4ème Conférence Internationale sur la protection des réacteurs - Paris 9-13 Octobre 1972

[17] R.V. MEGHREBLIAN - D.K. HOLMES
Reactor Analysis
(Mc Graw Hill - 1960) - Chap. 10, § 3.

[18] V.K. JAIN - A. KAVENOKY - M. LIVOLANT - H. LORAIN
EXCALIBUR. Code de résolution de l'équation du transport pour les milieux hétérogènes dans l'approximation multigroupe.
Rapport SPM n° 1140 (1970)